



LUONNONTIETEELLINEN TIEDEKUNTA  
MATEMAATTISTEN TIETEIDEN TUTKINTO-OHJELMA

## **MURTODIFFERENTIAALIIYHTÄLÖIDEN NUMEERINEN RATKAISEMINEN**

Lassi Korhonen  
Pro gradu -tutkielma  
Matemaattisten tieteiden  
tutkimusyksikkö  
Syyskuu 2020

## **TIIVISTELMÄ**

Murtodifferentiaaliyhtälö on differentiaaliyhtälö, jossa esiintyy derivaattoja, joiden kertaluku ei ole kokonaisluku. Tämän kaltaisilla yhtälöillä voidaan mallintaa ilmiöitä, joissa esiintyy muistia. Tällöin ilmiön tuleva käyttäytyminen riippuu sen hetkisen tilanteen lisäksi myös aikaisemmasta käyttäytymisestä.

Tässä työssä tutustutaan murtodifferentiaaliyhtälöiden perusteisiin niin teorian kuin käytännönkin osalta. Teorian osalta esitellään tunnetuimmat määritelmät ja työkalut, jotka ovat myös välttämättömiä numeeristen laskenta-algoritmien ymmärtämisessä. Käytännön sovellusten kannalta, ja sen vuoksi myös tämän työn keskeisin käsitelty määritelmä, on Caputon derivaatta, joka mahdollistaa luonnollisen tavan käsitellä alkuarvotehtäviä.

Käytännön osuus tässä työssä alustetaan tutustumalla muutamiin eri tapoihin ratkaista tavallisten differentiaaliyhtälöiden alkuarvotehtäviä. Nämä menetelmät toimivat johdantona ja vertailukohtana työssä esiteltäviin murtodifferentiaaliyhtälöiden numeerisiin ratkaisumenetelmiin, jotka johdetaan ja perustellaan yksityiskohtaisesti. Näiden menetelmien suoriutumista testataan muutamalla eri malliongelmalla ja suoriutumista mitataan tarkkuuden lisäksi myös nopeudella. Laskenta-algoritmit on ohjelmoitu osana tätä työtä ja ne ovat mukana työn liitteinä.

**Korhonen Lassi (2020) Numerical Methods for Fractional Differential Equations.** Faculty of Science, Mathematical Sciences, University of Oulu, Oulu, Finland. Master's Thesis, 36 p.

## **ABSTRACT**

A fractional differential equation is a differential equation involving derivatives with a non-integer order. These kind of equations can be useful when modelling phenomena with memory. If the system has a memory effect, not only the present situation affects to the later behaviour, but the history of the system as well.

We familiarize ourselves with the basics of the theory and practise of the fractional differential equations in this work. The most known definitions and tools, that are also crucial for understanding the numerical algorithms, are presented. The most important definition presented, for this work and when dealing with the real life applications, is the Caputo derivative. The Caputo derivative allows to use natural initial conditions which is necessary when solving initial value problems with fractional derivatives.

As an introduction to practise and numerical analysis of fractional differential equations, a couple of numerical methods for initial value problems of ordinary differential equations are given. These methods can be compared with and lead to the numerical methods for solving fractional differential equations presented in this work. These methods are justified with a detailed manner and they are applied to few model problems. The speed and precision of the methods for each of the problems were measured and the results are published in this work. The algorithms for the methods have been programmed as a part of this work and the source codes of these routines can be found as attachments.

# SISÄLLYSLUETTELO

## TIIVISTELMÄ

## ABSTRACT

## SISÄLLYSLUETTELO

## LYHENTEIDEN JA MERKKIEN SELITYKSET

<b>1. JOHDANTO</b>	<b>6</b>
<b>2. TARVITTAVIA TYÖKALUJA</b>	<b>8</b>
<b>3. MURTODIFFERENTIAALIYHTÄLÖIDEN TEORIAA</b>	<b>11</b>
3.1. Riemann-Liouvillen murtointegraali ja -derivaatta . . . . .	11
3.2. Caputon murtoderivaatta . . . . .	13
3.3. Murtodifferentiaaliyhtälön alkuarvotehtävä . . . . .	14
3.3.1. Eräitä Cauchy-tyyppisen ongelman erikoistapauksia . . . .	15
<b>4. MURTODIFFERENTIAALIYHTÄLÖN NUMEERINEN RATKAISEMINEN</b>	<b>17</b>
4.1. Perusteet: Tavalliset differentiaaliyhtälöt . . . . .	17
4.1.1. Runge-Kutta-menetelmiä . . . . .	18
4.2. Murtodifferentiaaliyhtälöt . . . . .	20
4.2.1. Paloittain vakio approksimaatio . . . . .	21
4.2.2. Paloittain lineaarinen approksimaatio . . . . .	23
<b>5. MENETELMIEN VERTAILUA</b>	<b>26</b>
5.1. Testit . . . . .	26
5.2. Malliongelma 1 . . . . .	27
5.3. Malliongelma 2 . . . . .	29
5.4. Malliongelma 3 . . . . .	30
5.5. Malliongelma 4 . . . . .	31
<b>6. YHTEENVETO</b>	<b>34</b>
<b>7. LÄHTEET</b>	<b>35</b>

## LYHENTEIDEN JA MERKKIEN SELITYKSET

$\lceil \alpha \rceil$	kattofunktio, $\alpha \in \mathbb{R}$
$\Gamma(\alpha)$	Eulerin gammafunktio, $\alpha \in \mathbb{R}_+$
$\phi_j(t)$	hattufunktio, $t \in ]t_{j-1}, t_j]$
$\psi_j(t)$	laatikkofunktio, $t \in ]t_j, t_{j+1}]$
$D^n$	tavallinen derivaatta kertalukua $n$ , $n \in \mathbb{N}$
$D_a^\alpha$	Riemann-Liouvilleen murtoderivaatta kertalukua $\alpha$ , $0 \leq \alpha \in \mathbb{R}$
$D_{*a}^\alpha$	Caputon murtoderivaatta kertalukua $\alpha$ , $0 \leq \alpha \in \mathbb{R}$
$E_{\alpha,\beta}(t)$	kaksiparametrinen Mittag-Leffler-funktio, $\alpha, \beta \in \mathbb{R}_+$
$I_a^\alpha$	Riemann-Liouvilleen murtointegraali kertalukua $\alpha$ , $0 \leq \alpha \in \mathbb{R}$
$L$	Lipschitz-vakio, $L \in \mathbb{R}_+$
$\tilde{f}$	funktion $f$ paloittain vakio approksimaatio
$\hat{f}$	funktion $f$ paloittain lineaarinen approksimaatio
$y^{(j)}(t)$	funktion $y$ kertaluvun $j$ derivaatta
$y_i$	approksimaatio arvolle $y(t_i)$
$y_i^{[m]}$	arvon $y(t_i)$ approksimaation $m$ :s kiintopisteiteraatio
PVA	Paloittain Vakio Approksimaatio -menetelmä
PLAE	Paloittain Lineaarinen Approksimaatio Ennusteella -menetelmä
PLAI1	Paloittain Lineaarinen Approksimaatio Iteraatioilla -menetelmä, yksi iteraatiokierros
PLAI2	Paloittain Lineaarinen Approksimaatio Iteraatioilla -menetelmä, kaksi iteraatiokierrosta

## 1. JOHDANTO

"Murtodifferentiaaliyhtälöt ovat kivoja." oli ensimmäinen virke, jonka kirjoitin tähän työhön, vaikka en ollut tutustunut aiheeseen juuri lainkaan. Murtodifferentiaaliyhtälö onkin sinällään erikoinen tapaus, sillä siinä rikotaan erästä luonnolliselta tuntuva sääntöä: derivoinnin kertaluku on kokonaisluku. Tämän säännön rikkominen aiheuttaa monia ylimääräisiä mutkia differentiaaliyhtälöiden käsittelyyn ja tämän työn lukija voi mielessään pohtia, onko se kivaa vai ei.

Edellä mainitun säännön rikkomisesta keskustelivat tietävästi ensimmäisenä matemaatikot Guillaume de L'Hospital ja Gottfried Wilhelm Leibniz vuonna 1695. Asiaan perehdyttiin kuitenkin paremmin vasta noin 150 vuotta myöhemmin [20]. Murtodifferentiaaliyhtälössä on siis kysymys siitä, että yhtälössä esiintyy derivaatta, jonka kertaluku ei ole kokonaisluku. Tämän kaltaisen yhtälön käsittely edellyttää murtoderivaatan määrittelemisen lisäksi myös määritelmää murtointegraalille, jonka tulisi toimia edellisen käänteisoperaationa. Murtointegraali ja derivaatta voidaan määritellä usealla eri tavalla. Tässä työssä esitellään Riemann-Liouvillen määritelmät näille molemmille ja Caputon määritelmä murtoderivaatalle. Caputon määritelmä on tämän työn kannalta erityisen tärkeä, sillä määritelmä johtaa lokaaleihin alkuehtoihin, jotka ovat käytännössä edellytys käytännön murtodifferentiaaliyhtälön ratkaisemiseksi [4].

Murtodifferentiaaliyhtälöillä voidaan mallintaa monien tieteenalojen ongelmia. Erityisen hyvin murtodifferentiaaliyhtälö sopii mallintamaan sellaisia ongelmia, joiden mekanismi on muistillinen. Tällöin tavallinen differentiaaliyhtälö ei ole sovelias mallinnustapa, sillä se ei huomioi ilmiön historiaa, vaan toimii siitä välittämättä eli lokaalisti. Muistillisia ilmiöitä esiintyy muun muassa fysiikassa sähkömagnetismin ja kvanttimekaniikan alueilla. Fysiikka onkin eräs niistä tieteenaloista, joka on ottanut murtodifferentiaaliyhtälöt onnistuneesti käyttöön ilmiöiden mallintamisessa [19]. Toinen tieteenala, jossa murtodifferentiaaliyhtälöille on löydetty mallinnuskohteita, on lääketiede ja erityisesti syöpähoidot [21, 25].

Tässä työssä lähtökohtana on ollut selvittää ja tutkia murtodifferentiaaliyhtälöiden numeeriseen ratkaisemiseen soveltuvia menetelmiä, luoda näitä menetelmiä vastaavat laskenta-algoritmit ja ratkaista näillä algoritmeilla muutamia testiongelmia eri parametreilla. Myös numeeristen ratkaisumenetelmien teoreettiset perusteet on pyritty tuomaan selkeästi esille.

Luvussa 2 esitellään merkintöjä ja perustyökaluja, joita tarvitaan murtodifferentiaaliyhtälöiden käsittelyssä. Nämä työkalut ovat määritelmiä ja lauseita, joiden avulla murtodifferentiaaliyhtälöiden teoreettiset ja numeeriset käsittelyt ovat ensinkään järkevästi mahdollisia. Työkalut on koottu omaksi luvukseen, jotta lukijan on helpo palata niihin työn muista luvuista.

Luku 3 käsittelee murtodifferentiaaliyhtälöiden perusteoriaa. Luvussa esitellään Riemann-Liouvillen määritelmät murtoderivaatalle ja -integraalille, sekä niihin liittyviä ominaisuuksia. Riemann-Liouvillen derivaatan määritelmän ongelmallisuus käytännön sovelluksissa havainnollistetaan myös ja näin luodaan peruste Caputon määritelmän käyttämiselle itse sovelluksissa. Tämän luvun ydin koostuu Caputon murtoderivaatan määritelmästä ja sen ominaisuuksista. [4, 14, 15]. Määritelmän ja ominaisuuksien lisäksi luvun lopussa esitellään, millaisia ratkaisuja Capu-

ton määritelmä murtoderivaatalle tuottaa, kun sitä sovelletaan Cauchy-tyyppisiin esimerkkiongelmiin.

Varsinaisiin murtodifferentiaaliyhtälöiden numeerisiin ratkaisumenetelmiin päästään luvussa 4. Luvun alussa esitellään johdatuksena aiheeseen muutamia tunnettuja menetelmiä, joilla voidaan ratkoa tavallisia differentiaaliyhtälöitä numeerisesti. Nämä menetelmät pyritään selittämään perusteellisesti, jotta lukija voi käyttää niitä hyvänä vertailupohjana siirtyessään tutkimaan murtodifferentiaaliyhtälöihin sopivia menetelmiä. Murtodifferentiaaliyhtälöiden ratkaisemista lähestytään tässä luvussa Caputon derivaatan määritelmään perustuen lähteen [4] mukaisia menetelmiä käyttäen. Ratkaisemisen periaatteet esitellään yksityiskohtaisesti ja lisäksi esitellään tapoja, joilla kehitettyä laskenta-algoritmia voidaan muokata kohteen tarkkuusvaatimuksien ja käytettävissä olevien laskentaresurssien mukaan. Menetelmien yhdenmukaisuuksia ja eroja tavallisten differentiaaliyhtälöiden ratkaisumenetelmiin pyritään tuomaan myös esille, jotta lukijalle jäisi selkeä kuva murtodifferentiaaliyhtälöiden luonteen mukanaan tuomista haasteista ratkaisutavoissa.

Tämän työn viimeisessä luvussa esiteltyjä murtodifferentiaaliyhtälöiden laskenta-algoritmeja sovelletaan neljään erilaiseen testiongelmaan. Kaikki ongelmat ovat Cauchy-tyyppisiä ja jokaisen ongelman kohdalla testataan myös menetelmien suoriutumista kahdella eri kertaluvulla  $\alpha$ . Testattavia menetelmiä on neljä erilaista ja jokaisen ongelman kohdalla esitellään kunkin menetelmän tarkkuus ja nopeus kahdeksalla eri askelpituudella. Lisäksi arvioidaan kunkin menetelmän suppenemisnopeutta askelpituuden suhteen. Kunkin testin kohdalla lukijalle esitellään myös merkittävimmät huomiot ja pohdiskelut tulosten osalta.

## 2. TARVITTAVIA TYÖKALUJA

Seuraavia tuloksia, lauseita ja määritelmiä tarvitaan yleisesti murtodifferentiaaliyhtälöiden ja niiden numeerisen ratkaisemisen yhteydessä. Tässä luvussa esitellään muun muassa käytettyjä merkintöjä, gammafunktio ja analyysin peruslause sekä siihen liittyviä tuloksia.

Murtodifferentiaaliyhtälöiden käsittelyssä on erityisen hyödyllistä käyttää selkeitä ja johdonmukaisia merkintöjä. Olkoot jatkossa  $f$  muuttujan  $t \in \mathbb{R}$  funktio ellei toisin merkitä ja  $n \in \mathbb{N}$ . Tässä työssä tavalliselle derivaatalle  $\frac{df}{dt}$  käytetään merkintöjä

$$\frac{df}{dt} = f'(t) \text{ tai } \frac{df}{dt} = Df(t),$$

missä  $D$  on siis ensimmäisen kertaluvun differentiaalioperaattori. Kertaluvun  $n$  derivaatalle  $\frac{d^n f}{dt^n}$  käytetään puolestaan merkintöjä

$$\frac{d^n f}{dt^n} = f^{(n)}(t) \text{ tai } \frac{d^n f}{dt^n} = D^n f(t)$$

ja lisäksi  $f^{(0)}(t) = D^0 f(t) = f(t)$ . Funktion  $f$  integraali  $\int_0^t f(s) ds$  lyhennetään tarvittaessa merkinnällä

$$\int_0^t f(s) ds = If(t),$$

Kahden peräkkäisen integroinnin tapauksessa merkintä on

$$\int_0^t \int_0^\tau f(s) ds d\tau = I(If(t)) = I^2 f(t).$$

Yleistäen edellinen,  $I^n f(t)$  tarkoittaa  $n$ :ää peräkkäistä integraalia funktiolle  $f$  ja lisäksi  $I^0 f(t) = f(t)$ . Peräkkäisille integraaleille on voimassa kaava

$$I^n f(t) = \frac{1}{(n-1)!} \int_0^t (t-s)^{n-1} f(s) ds, \quad (1)$$

joka tunnetaan nimellä **Cauchyn kaava peräkkäisille integraaleille** [4, 14, 20]. Jos integroinnin alaraja  $a \in \mathbb{R}$  on nollasta poikkeava, lyhennetty merkintä on

$$\int_a^t f(s) ds = I_a f(t).$$

Seuraavaksi määritellään muutamia murtodifferentiaaliyhtälöiden kannalta olennaisia apufunktioita.

**Määritelmä 1.** Funktiota  $\Gamma : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$ ,

$$\Gamma(\alpha) = \int_0^\infty s^{\alpha-1} e^{-s} ds, \quad (2)$$

sanotaan **Eulerin gammafunktioksi** [13, 14, 20].



Gammafunktio on luonnollisille luvuille määritellyn kertomafunktion yleistys reaali- ja kompleksiluvuille [13, 14]. Kertomafunktio on gammafunktion erikoistapaus ja niiden välillä on yhteys

$$\Gamma(n+1) = n!. \quad (3)$$

Gammafunktion eräs tärkeimmistä ominaisuuksista on sen rekursio-ominaisuus

$$\Gamma(\alpha+1) = \alpha\Gamma(\alpha). \quad (4)$$

Tämä ominaisuus mahdollistaa esimerkiksi gammafunktion arvojen laskemisen suoraviivaisesti myös silloin, kun  $t$  ei ole luonnollinen luku [20].

**Lause 1.** *Olkoot  $\alpha, \beta \in \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$ . Tällöin*

$$\int_0^t s^{\alpha-1}(t-s)^{\beta-1} ds = \frac{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)}{\Gamma(\alpha+\beta)} t^{\alpha+\beta-1}. \quad (5)$$

*Todistus.* Tämän lauseen todistus löytyy lähteestä [13].  $\square$

**Lause 2.** *Taylorin sarja. Olkoot  $a, b \in \mathbb{R}$ ,  $m \in \mathbb{N}$  ja  $f$   $m$  kertaa derivoituva välillä  $[a, b]$ . Tällöin kaikilla  $t, t_0 \in [a, b]$  on voimassa*

$$f(t) = \sum_{j=0}^{m-1} \frac{f^{(m)}(t_0)(t-t_0)^j}{j!} + I_{t_0}^m D^m f(t). \quad (6)$$

*Todistus.* Todistus on löydettävissä lähteestä [23].  $\square$

Tavallisten differentiaaliyhtälöiden ratkaisujen keskeinen funktio on eksponenttifunktio. Murtodifferentiaaliyhtälöiden tapauksessa vastaava funktio on **Mittag-Leffler-funktio**, joka voidaan ajatella eksponenttifunktion yleistykseksi.

**Määritelmä 2.** Niin sanottu kaksiparametrinen Mittag-Leffler-funktio määritellään potenssisarjana

$$E_{\alpha,\beta}(t) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{t^j}{\Gamma(\alpha j + \beta)}, \quad (7)$$

missä  $\alpha, \beta \in \mathbb{R}_+$  [13, 14, 15].

Kun  $\alpha = \beta = 1$ , saadaan

$$E_{1,1}(t) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{t^j}{\Gamma(j+1)} = e^t,$$

joten eksponenttifunktio on todellakin Mittag-Leffler-funktion erikoistapaus. Eräs tässä työssä myöhemmin tarvittava erikoistapaus on

$$E_{\frac{1}{2},1}(t) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{t^j}{\Gamma(\frac{1}{2}j+1)} = e^{t^2} \operatorname{erfc}(-t), \quad (8)$$

missä  $\operatorname{erfc}$  on **virhefunktion**

$$\operatorname{erf}(t) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^t e^{-s^2} ds \quad (9)$$

komplementti,

$$\operatorname{erfc}(t) = 1 - \operatorname{erf}(t) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_t^\infty e^{-s^2} ds. \quad (10)$$

Lisää Mittag-Leffler-funktion erikoistapauksia ja niiden perusteluita löytyy lähteistä [4], [17] ja [24].

**Määritelmä 3.** Olkoon  $\alpha \in \mathbb{R}$ . Kaavalla

$$\lceil \alpha \rceil = \min\{n \in \mathbb{Z} \mid n \geq \alpha\} \quad (11)$$

määriteltyä funktiota sanotaan **kattofunktioksi** [14].

Murtodifferentiaaliyhtälöiden numeerisessa ratkaisemisessa on seuraava perustulos avainasemassa [14, 22].

**Lause 3.** Analyysin peruslause. *Olkoon  $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$  jatkuva. Määritellään funktio  $F : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$  kaavalla*

$$F(t) = \int_a^t f(s) ds, \quad (12)$$

*Tällöin  $F$  on derivoituva ja  $F' = DF = f$ . Selvästi nähdään, että tämä tulos yleistyy vielä muotoon  $D^n I^n f = f$  kaikilla  $n \in \mathbb{N}$ .*

*Todistus.* Analyysin peruslauseen todistus löytyy esimerkiksi lähteestä [22].  $\square$

Olkoot  $a, b \in \mathbb{R}$  ja  $a < b$ . Analyysin peruslauseen mukaan on voimassa myös yhtälö

$$f(b) - f(a) = \int_a^b f'(s) ds, \quad (13)$$

jota voidaan hyödyntää differentiaaliyhtälöiden alkuarvotehtävien ratkaisumenetelmissä, kuten tullaan huomaamaan.

**Määritelmä 4.** Olkoot  $a, b \in \mathbb{R}$  ja  $a < b$ . Funktio  $f$  on **Lipschitz-jatkuva** välillä  $[a, b]$ , jos jollakin  $L \in \mathbb{R}_+$  pätee

$$|f(t_1) - f(t_2)| \leq L|t_1 - t_2|, \quad (14)$$

kaikilla  $t_1, t_2 \in [a, b]$ .

### 3. MURTODIFFERENTIAALIYHTÄLÖIDEN TEORIAA

Murtodifferentiaaliyhtälöiden käsittelyssä tarvitaan luonnollisesti sopivia määritelmiä murtointegraalille ja -derivaatalle. Määritelmiä on useita erilaisia näistä ehkä tunnetuimpia ovat Riemann-Liouvillen määritelmät, Grünwald-Letnikovin määritelmät ja lisäksi sovellusten kannalta tärkeä Caputon määritelmä murtoderivaatalle [4, 15]. Tässä luvussa tutustutaan tarkemmin Riemann-Liouvillen ja Caputon murtodifferentiaalilaskennan lähestymistapoihin.

#### 3.1. Riemann-Liouvillen murtointegraali ja -derivaatta

Edellisessä luvussa esitettiin kaava (1) peräkkäisille integraaleille, kun integraalien lukumäärä eli kertaluku  $n \in \mathbb{N}$ . Seuraava määritelmä yleistää tilanteen siten, että integroinnin kertaluku voi olla muutakin kuin luonnollinen luku.

**Määritelmä 5.** Olkoot  $0 < \alpha \in \mathbb{R}$ ,  $a, b \in \mathbb{R}$  ja  $t \in [a, b]$ . Olkoon lisäksi funktio  $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$  jatkuva. **Riemann-Liouvillen murtointegraali** määritellään kaavalla

$$I_a^\alpha f(t) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_a^t (t-s)^{\alpha-1} f(s) ds. \quad (15)$$

Jos  $\alpha = 0$ , asetetaan  $I_a^0 f(t) = f(t)$ .

Määritelmään 5 liitetyt oletukset ovat jatkossa aina, kun käsitellään Riemann-Liouvillen murtointegraalia, ellei toisin mainita.

**Lause 4.** Olkoot  $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ . Riemann-Liouvillen murtointegraalille on voimassa

$$I_a^\alpha (I_a^\beta f(t)) = I_a^\beta (I_a^\alpha f(t)) = I_a^{\alpha+\beta} f(t) \quad (16)$$

kaikilla  $\alpha, \beta \geq 0$ .

*Todistus.* Perustelut tämän niin sanotun **puoliryhmäominaisuuden** voimassaololle löytyvät kattavasti lähteestä [13].  $\square$

**Määritelmä 6.** Olkoon  $m = \lceil \alpha \rceil$ . Derivaattaa

$$D_a^\alpha f(t) = D^m I_a^{m-\alpha} f(t) = \frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \frac{d^m}{dt^m} \int_a^t (t-s)^{m-\alpha-1} f(s) ds \quad (17)$$

sanotaan **Riemann-Liouvillen murtoderivaataksi**. Lisäksi asetetaan  $D^0 f(t) = f(t)$ .

Tämä derivaatan määritelmä on luonnollinen, sillä se on vastaavaa kertalukua  $\alpha$  olevan integraalin (15) vasemman puoleinen käänteiskuvaus, kuten seuraavasta lauseesta käy ilmi.

**Lause 5.** Olkoon  $\alpha \geq 0$ . Tällöin

$$D_a^\alpha I_a^\alpha f(t) = f(t). \quad (18)$$

*Todistus.* Määritelmän 6, Lauseen 4 ja Lauseen 3 perusteella,

$$D_a^\alpha I_a^\alpha f(t) = D^m I_a^{m-\alpha} I_a^\alpha f(t) = D^m I_a^m f(t) = f(t).$$

□

Kun murtointegraalille ja -derivaatalle on näin esitelty järkevät määritelmät, sovelletaan niitä ratkaisun luonteen havainnollistamiseksi murtodifferentiaaliyhtälöön

$$D_a^\alpha y(t) = f(t), \quad (19)$$

missä  $0 < \alpha < 1$ . Määrätään ratkaisu tälle yhtälölle lähteessä [14] esitettyjä vaiheita mukaillen. Nyt  $0 < \alpha < 1$ , joten Määritelmän 6 mukaan

$$D_a^\alpha y(t) = D I_a^{1-\alpha} y(t) = f(t).$$

Kyseessä on siis tavallinen differentiaaliyhtälö funktion  $h(t) = I_a^{1-\alpha} y(t)$  suhteen. Edellisen perusteella saadaan siis yhtälö

$$Dh(t) = f(t).$$

Integroimalla tämä yhtälö puolittain ja soveltamalla Lausetta 3 (Analyysin peruslause) saadaan

$$I_a Dh(t) = I_a^{1-\alpha} y(t) = \lim_{t \rightarrow a_+} I_a^{1-\alpha} y(t) + I_a f(t).$$

Koska Riemann-Liouvillen derivaatta on Lauseen 5 perusteella vastaavan integraalin vasemman puoleinen käänteiskuvaus, niin ratkaisuksi saadaan

$$y(t) = \lim_{t \rightarrow a_+} I_a^{1-\alpha} y(t) D_a^{1-\alpha} 1 + D_a^{1-\alpha} I_a f(t). \quad (20)$$

Helpolla laskulla Määritelmän 6 perusteella nähdään, että

$$D_a^{1-\alpha} 1 = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} t^{\alpha-1}.$$

Käyttämällä lisäksi hyväksi Lausetta 4 huomataan, että

$$\begin{aligned} D_a^{1-\alpha} I_a f(t) &= D I_a^\alpha I_a f(t) = D I_a I_a^\alpha f(t) = I_a^\alpha f(t) \\ &= \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_a^t (t-s)^{\alpha-1} f(s) ds. \end{aligned}$$

Yhtälön (19) Ratkaisulle (20) saadaan näin esitys

$$y(t) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} t^{\alpha-1} \lim_{t \rightarrow a_+} I_a^{1-\alpha} y(t) + \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_a^t (t-s)^{\alpha-1} f(s) ds. \quad (21)$$

Ratkaisun muodosta huomataan heti, että se edellyttää ei-lokaalin alkuehdon  $\lim_{t \rightarrow a_+} I_a^{1-\alpha} y(t)$  tuntemista. Tämä ei ole toivottava tilanne käytännön sovelluksissa [4, 14].

### 3.2. Caputon murtoderivaatta

Käytännön murtodifferentiaaliyhtälöiden alkuarvotehtävien ratkaiseminen edellyttää yleensä tavallisen alkuehdon tuntemista. Tällöin Riemann-Liouvillen määritelmä murtoderivaatalle ei ole sovelias, sillä se edellyttää ei-lokaalin alkuehdon tuntemista, kuten edellä huomattiin. Tämän vuoksi tarvitaan uusi, alkuarvotehtäviin soveliaampi määritelmä murtoderivaatalle.

**Määritelmä 7.** Olkoot  $a, b \in \mathbb{R}$ ,  $t \in [a, b]$ ,  $0 \leq \alpha \in \mathbb{R}$  ja  $m = \lceil \alpha \rceil$ . Oletetaan lisäksi, että  $y(t)$  on jatkuvasti derivoituva  $m$  kertaa välillä  $[a, b]$ . Kertaluvun  $\alpha$  **Caputon (murto)derivaatta** määritellään kaavalla

$$D_{*a}^{\alpha} y(t) = I_a^{m-\alpha} D^m y(t) = \frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \int_a^t (t-s)^{m-\alpha-1} y^{(m)}(s) ds. \quad (22)$$

Määritelmän 7 oletukset ovat voimassa jatkossa aina Caputon derivaattaa käsiteltäessä, ellei toisin mainita.

**Lause 6.** *Caputon derivaatalle on voimassa*

$$I_a^{\alpha} D_{*a}^{\alpha} y(t) = y(t) - \sum_{j=0}^{m-1} \frac{y^{(j)}(a)}{j!} (t-a)^j. \quad (23)$$

*Todistus.* Määritelmän 7 mukaan  $D_{*a}^{\alpha} y(t) = I_a^{m-\alpha} D^m y(t)$ . Laskemalla integraali  $I_a^{\alpha}$  puolittain tästä määritelmästä saadaan

$$I_a^{\alpha} D_{*a}^{\alpha} y(t) = I_a^{\alpha} I_a^{m-\alpha} D^m y(t) = I_a^m D^m y(t).$$

Nyt Lauseen 2 perusteella

$$I_a^m D^m y(t) = y(t) - \sum_{j=0}^{m-1} \frac{y^{(j)}(a)}{j!} (t-a)^j.$$

□

**Lause 7.** *Olkoot  $0 < \alpha \in \mathbb{R}$ ,  $a = t_0 = 0$  ja  $\lambda \in \mathbb{R}$ . Caputon derivaatalla määritellyn murtoderivaatan ominaisarvoa  $\lambda$  vastaava ominaisfunktio voidaan esittää Mittag-Leffler-funktion avulla siten, että*

$$D_{*0}^{\alpha} E_{\alpha,1}(\lambda t^{\alpha}) = \lambda E_{\alpha,1}(\lambda t^{\alpha}). \quad (24)$$

*Todistus.* Tämän todistuksen pohjana on lähde [14]. Merkitään  $m = \lceil \alpha \rceil$ . Caputon derivaatta on Määritelmän 7 mukaan  $D_{*a}^{\alpha} = I_a^{m-\alpha} D^m$ . Koska Caputon derivaatta on lineaarinen, se voidaan laskea termeittäin sarjakehitelmälle (7). Laskemalla ensin derivaatta yksittäiselle termille ja käyttämällä hyväksi gammafunktion rekursio-ominaisuutta (4)  $m$  kertaa, saadaan

$$\begin{aligned} D^m \left( \frac{\lambda t^{\alpha j}}{\Gamma(\alpha j + 1)} \right) &= \frac{\alpha j(\alpha j - 1) \dots (\alpha j - m + 1) t^{\alpha j - m}}{\Gamma(\alpha j + 1)} \\ &= \frac{t^{\alpha j - m}}{\Gamma(\alpha j - m + 1)}. \end{aligned}$$

Lähteessä [14] esitetyn mukaisesti polynomin  $p(t) = t^n$ ,  $n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ , kertalukua  $m - \alpha$  oleva integraali on

$$I_0^{m-\alpha} t^n = \frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(n+m-\alpha+1)} t^{n+m-\alpha}.$$

Yhdistämällä tämä edellä laskettuun derivaattaan saadaan

$$\begin{aligned} I_0^{m-\alpha} D^m \left( \frac{\lambda t^{\alpha j}}{\Gamma(\alpha j + 1)} \right) &= \frac{\lambda^j \Gamma(\alpha j - m + 1)}{\Gamma(\alpha j - \alpha + 1) \Gamma(\alpha j - m + 1)} t^{\alpha j - \alpha} \\ &= \frac{\lambda^j t^{\alpha(j-1)}}{\Gamma(\alpha(j-1) + 1)}. \end{aligned}$$

Kun  $j = 0$  ja  $m > 0$ , niin edellä lasketun perusteella

$$I_0^{m-\alpha} D^m \left( \frac{\lambda t^{\alpha j}}{\Gamma(\alpha j + 1)} \right) = I_0^{m-\alpha} D^m \left( \frac{\lambda}{\Gamma(1)} \right) = 0,$$

sillä vakion derivaatta on nolla. Ottamalla mukaan sarjakehitelmän (7) kaikki termit ja käyttämällä hyväksi Caputon derivaatan lineaarisuutta saadaan

$$D_{*0}^\alpha E_{\alpha,1}(\lambda t^\alpha) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\lambda^{j-1} t^{\alpha(j-1)}}{\Gamma(\alpha(j-1) + 1)} = \lambda \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\lambda^j t^{\alpha j}}{\Gamma(\alpha j + 1)} = \lambda E_{\alpha,1}(\lambda t^\alpha).$$

Viimeisessä yhtäsuuruudessa tehtiin indeksinvaihto  $j - 1 \leftrightarrow j$ .  $\square$

Tämä lause antaa vahvan perustelun sille, että Mittag-Leffler-funktio on keskeisessä asemassa murtodifferentiaaliyhtälöiden ratkaisujen muodostumisessa, kuten myöhemmin Lauseesta 9 tullaan havaitsemaan. Sen asema on samankaltainen kuin eksponenttifunktiolla tavallisten differentiaaliyhtälöiden tapauksessa.

### 3.3. Murtodifferentiaaliyhtälön alkuarvotehtävä

Olko Määritelmään 7 liitetyt oletukset voimassa. Tarkastellaan seuraavaksi Caputon derivaatan avulla määriteltä yhdessä termin yhtälöä normaalimuodossaan,

$$D_{*0}^\alpha y(t) = f(t, y(t)), \quad t \geq a \in \mathbb{R}, \quad (25)$$

alkuehdoilla

$$y_a^{(j)} = D^j y(a), \quad j = 0, 1, 2, \dots, [\alpha] - 1.$$

Tämän kaltaista ongelmaa kutsutaan toisinaan myös **Cauchy-tyyppiseksi ongelmaksi** [15].

**Lause 8.** *Olko  $a = 0$  ja*

$$y_0^{(j)} = D^j y(0), \quad j = 0, 1, 2, \dots, [\alpha] - 1,$$

*ongelman (25) alkuehdot. Näin saatu alkuarvotehtävä voidaan palauttaa toisen lajin Volterran yhtälöksi*

$$y(t) = \sum_{j=0}^{[\alpha]-1} \frac{y_0^{(j)}}{j!} t^j + \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^t (t-s)^{\alpha-1} f(s, y(s)) ds. \quad (26)$$

*Todistus.* Olkoot  $m = \lceil \alpha \rceil$  ja  $y_0^{(n)} = y^{(n)}(0)$ . Kun  $a = 0$ , yhtälö (25) on

$$D_{*0}^\alpha y(t) = f(t, y(t)).$$

Laskemalla integraali  $I_0^\alpha$  tälle yhtälölle puolittain ja soveltamalla Lausetta 6 saadaan

$$\begin{aligned} I_0^\alpha D_{*0}^\alpha y(t) &= I_0^\alpha f(t, y(t)) \\ y(t) - \sum_{j=0}^{m-1} \frac{y^{(j)}(0)}{j!} t^j &= I_0^\alpha f(t, y(t)) \\ y(t) &= \sum_{j=0}^{m-1} \frac{y^{(j)}(0)}{j!} t^j + I_0^\alpha f(t, y(t)) \\ &= \sum_{j=0}^{m-1} \frac{y_0^{(j)}}{j!} t^j + \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^t (t-s)^{\alpha-1} f(s, y(s)) \, ds. \end{aligned}$$

□

Kannattaa huomata, että tässä työssä murtodifferentiaaliyhtälöiden alkuarvotekävien alkuhetki on jatkossa aina valittu siten, että  $a = t_0 = 0$ . Käytännössä kaikki esitetyt ongelmat ja menetelmät on mahdollista yleistää koskemaan myös tilanteita, joissa alkuhetki  $t_0 = a$ ,  $a \in \mathbb{R}$  [4, 8].

### 3.3.1. Eräitä Cauchy-tyyppisen ongelman erikoistapauksia

Tässä luvussa esitellyt erikoistapaukset Cauchy-tyyppisestä ongelmasta on valittu sen perusteella, että niistä johdettuja ongelmia tullaan käyttämään malliongelmina testattaessa murtodifferentiaaliyhtälöiden ratkaisualgoritmeja Luvussa 5.

Olkoot  $0 < \alpha \in \mathbb{R}$ ,  $\lambda \in \mathbb{R}$  ja  $g$  jatkuva funktio välillä  $[0, b]$ . Tarkastellaan Caputon derivaatalla määriteltyä Cauchy-tyyppistä murtodifferentiaaliyhtälöä

$$D_{*0}^\alpha y(t) = \lambda y(t) + g(t), \quad 0 \leq t \leq b \quad (27)$$

alkuehdoilla

$$y_0^{(j)} = D^j y(0), \quad j = 0, 1, 2, \dots, \lceil \alpha \rceil - 1.$$

**Lause 9.** *Ongelman (27) yksikäsitteinen ratkaisu annetuilla alkuehdoilla on*

$$y(t) = \sum_{j=0}^{\lceil \alpha \rceil - 1} y_0^{(j)} t^j E_{\alpha, j+1}(\lambda t^\alpha) + \int_0^t (t-s)^{\alpha-1} E_{\alpha, \alpha}[\lambda(t-s)^\alpha] g(s) \, ds. \quad (28)$$

*Todistus.* Tämän lauseen todistus löytyy kokonaisuudessaan lähteestä [15].

Olkoot  $0 < p \in \mathbb{R}$  ja  $\gamma \in \mathbb{R}$ . Toinen esiteltävä erikoistapaus on yhtälö

$$D_{*0}^\alpha y(t) = \gamma t^p, \quad t \geq 0 \quad (29)$$

alkuehdoilla

$$y_0^{(j)} = D^j y(0) = 0, \quad j = 0, 1, 2, \dots, \lceil \alpha \rceil - 1.$$

**Lause 10.** Yhtälön (29) yksikäsitteinen ratkaisu homogeenisilla alkuehdoilla on

$$y(t) = \frac{\gamma \Gamma(p+1)}{\Gamma(p+\alpha+1)} t^{p+\alpha}. \quad (30)$$

*Todistus.* Yhtälö (29) on muotoa (27), kun valitaan  $\lambda = 0$ . Nyt siis  $g(t) = \gamma t^p$ , joka on jatkuva ja derivoituva. Tämän ongelman yksikäsitteinen ratkaisu on Lauseen 9 perusteella

$$\begin{aligned} y(t) &= \sum_{j=0}^{[\alpha]-1} y_0^{(j)} t^j E_{\alpha, j+1}(\lambda t^\alpha) + \int_0^t (t-s)^{\alpha-1} E_{\alpha, \alpha}[\lambda(t-s)^\alpha] g(s) \, ds \\ &= \frac{\gamma}{\Gamma(\alpha)} \int_0^t (t-s)^{\alpha-1} s^p \, ds. \end{aligned}$$

Lauseen 1 perusteella

$$\int_0^t (t-s)^{\alpha-1} s^p \, ds = \frac{\Gamma(\alpha) \Gamma(p+1)}{\Gamma(p+\alpha+1)} t^{p+\alpha},$$

joten

$$y(t) = \frac{\gamma}{\Gamma(\alpha)} \frac{\Gamma(\alpha) \Gamma(p+1)}{\Gamma(p+\alpha+1)} t^{p+\alpha} = \frac{\gamma \Gamma(p+1)}{\Gamma(p+\alpha+1)} t^{p+\alpha}.$$

□



## 4. MURTODIFFERENTIAALIYHTÄLÖN NUMEERINEN RATKAISEMINEN

### 4.1. Perusteet: Tavalliset differentiaaliyhtälöt

Olkoot  $a, b \in \mathbb{R}$  ja  $a < b$ . Tavallisen ensimmäisen kertaluvun differentiaaliyhtälön alkuarvotehtävä välillä  $[a, b]$  voidaan kirjoittaa normaalimuodossa

$$y'(t) = f(t, y(t)), \quad y_0 = y(a). \quad (31)$$

**Lause 11.** Picard-Lindelöfin lause. *Olkoot  $G = [a, b] \times \mathbb{R} \subset \mathbb{R}^2$  ja funktio  $f : G \rightarrow \mathbb{R}$  määritelty, rajoitettu ja jatkuva välillä  $t \in [a, b]$  jokaisella  $y \in \mathbb{R}$ . Oletetaan lisäksi, että  $f$  on Lipschitz-jatkuva muuttujan  $y$  suhteen jokaisella  $t \in [a, b]$  siten, että*

$$|f(t, y_1) - f(t, y_2)| \leq L|y_1 - y_2|,$$

missä  $0 < L \in \mathbb{R}$ ,  $(t, y_1) \in G$  ja  $(t, y_2) \in G$ . Tällöin alkuarvotehtävällä (31) on yksikäsitteinen ratkaisu.

*Todistus.* Tämän lauseen perustelut löytyvät lähteistä [4, 10, 16] ja [22]. □

Analyysin peruslauseen mukaan tämä yhtälö on yhtäpitävä integraaliyhtälön

$$y(t) = y_0 + \int_a^t f(s, y(s)) \, ds, \quad t \in [a, b] \quad (32)$$

kanssa [10].

Alkuarvotehtävä (31) voidaan ratkaista numeerisesti hyvin monella eri tavalla [6, 10, 12, 16]. Olkoot  $N \in \mathbb{N}$  ja  $h = \frac{b-a}{N}$ . Tunnetuimmat ja yleisimmät menetelmät perustuvat muuttujan  $t$  diskretisointiin

$$t_i = a + ih, \quad i = 0, 1, 2, \dots, N, \quad (33)$$

missä lukua  $h$  sanotaan askelpituudeksi. Perehdytään seuraavaksi muutamaan aikadiskretisointiin perustuvaan tavallisen differentiaaliyhtälön ratkaisumenetelmään, joille voidaan jatkossa esittää myös murtodifferentiaaliyhtälön alkuarvotehtävän ratkaisemiseen sopiva vastine.

Diskretisoidun muuttujan  $t$  avulla voidaan yhtälöstä (32) johtaa esitys

$$y(t_{i+1}) = y(t_i) + \int_{t_i}^{t_{i+1}} f(s, y(s)) \, ds, \quad i = 0, 1, 2, \dots, N. \quad (34)$$

Kun askelpituus  $h = t_{i+1} - t_i$  on pieni, tämän yhtälön integraalitermiä voidaan perustellusti approksimoida kvadratuurilla eli äärellisellä summalla

$$\int_{t_i}^{t_{i+1}} f(s, y(s)) \, ds \approx h \sum_{j=1}^n b_j k_j, \quad (35)$$

missä  $k_j = f(\xi_j, y(\xi_j))$ ,  $\xi_j \in [t_i, t_{i+1}]$ ,  $b_j \in \mathbb{R}$  ja  $\sum b_j = 1$ . Kun integraali korvataan tällä kvadratuurilla yhtälössä (34), syntyy luonnollisesti virhettä. Luvut  $b_j$  ja termit  $k_j$  valitaankin yleisesti niin, että lokaalivirheen

$$y(t_{i+1}) - y(t_i) - h \sum_{j=1}^n b_j k_j = O(h^{p+1}) \quad (36)$$

kertaluku  $p + 1$  on mahdollisimman suuri, mutta myös muita perusteita valinnoille käytetään [6, 16]. Tehdyn approksimaation vuoksi merkitään  $y_i \approx y(t_i)$ . Näin yhtälöstä (34) saadaan

$$y_{i+1} = y_i + h \sum_{j=1}^n b_j k_j, \quad i = 0, 1, 2, \dots, N. \quad (37)$$

Tätä muotoa käyttäviä alkuarvotehtävien ratkaisumenetelmiä sanotaan **Runge-Kutta-menetelmiksi**, jotka ovat niin kutsuttuja yksiaskelmenetelmiä. Tämä tarkoittaa sitä, että uutta arvoa  $y_{i+1}$  laskettaessa käytetään aikaisemmista arvoista hyväksi vain sitä edeltävää arvoa  $y_i$ . Summattavien termien eli vaiheiden lukumäärä  $n$  määrää luonnollisesti lokaalivirheen kertaluvun ylärajan. Jos lokaalivirhe on kertalukua  $p + 1$ , menetelmän kertaluku on  $p$ . Tämä on myös kyseisen menetelmän globaalin virheen kertaluku [10, 16].

#### 4.1.1. Runge-Kutta-menetelmiä

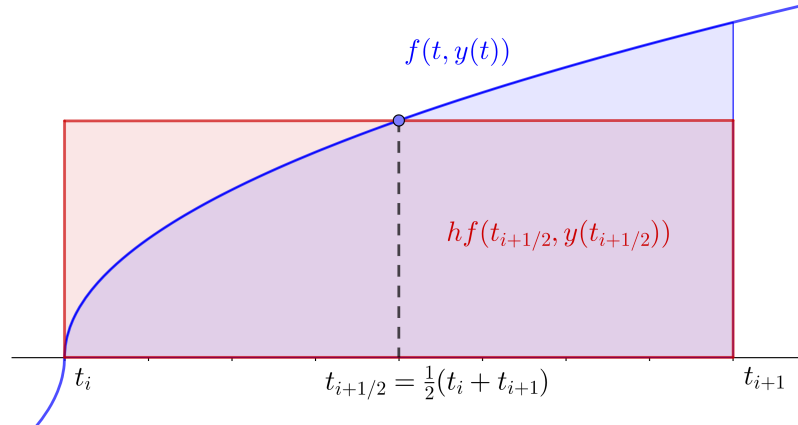
Runge-Kutta-menetelmiä voidaan johtaa periaatteessa rajattomasti kasvattamalla vaiheiden lukumäärää, vaikka vaatimus mahdollisimman korkeasta kertaluvusta säilytetäänkin. Käytännössä suosituimpia ovat menetelmät, joissa vaiheiden määrä on 1-4. Tätä monivaiheisemmat menetelmissä kertaluvun suhde vaiheisiin heikkenee (eksplisiittiset menetelmät) tai laskennallinen kompleksisuus kasvaa liian suureksi (implisiittiset menetelmät) [3, 16]. Tutustutaan seuraavaksi muutamaan tunnettuun Runge-Kutta menetelmään, joille on mahdollista löytää vastineet myös murtodifferentiaaliyhtälöiden tapauksessa.

Tarkastellaan yhtälöä (35). Yksinkertaisin kvadratuuri saadaan, kun summattavia termejä on vain yksi, jolloin

$$\int_{t_i}^{t_{i+1}} f(s, y(s)) ds \approx hb_1 k_1. \quad (38)$$

Tämä tarkoittaa, että funktiota  $f$  approksimoidaan vakiofunktioilla ja integraalia suorakaiteen pinta-alalla. Luonnollinen ja tarkkuuden kannalta paras valinta vakiofunktion arvolle löytyy integroimisvälin keskipisteestä ja näin muodostettu kvadratuurisääntö onkin nimeltään keskipistesääntö [22]. Katso Kuva 1. Kun integroimisväli on nyt  $[t_i, t_{i+1}]$ , niin puolivälin piste on  $t_{i+1/2} = \frac{1}{2}(t_i + t_{i+1})$  ja suorakaiteen pinta-ala

$$hb_1 k_1 = hf(t_{i+1/2}, y(t_{i+1/2})).$$



Kuva 1. Keskipistesääntö

Kun tarkat arvot  $y(t_i)$  korvataan vastaavilla approksimaatioilla  $y_i$ , alkuarvotehtävän numeeriselle ratkaisulle saadaan yhtälön (37) mukaisesti **implisiittinen keskipistesääntö -menetelmä**,

$$\begin{aligned} y_0 &= y(a) \\ y_{i+1} &= y_i + h f(t_{i+1/2}, y_{i+1/2}) \\ &= y_i + h f(t_{i+1/2}, \tfrac{1}{2}(y_{i+1} + y_i)). \end{aligned} \quad (39)$$

joka tunnetaan myös nimellä yksivaiheinen Gaussin menetelmä. Implisiittisyys nähdään siitä, että termi  $y_{i+1}$  esiintyy yhtälön molemmilla puolilla. Tämän menetelmän kertaluku  $p = 2$  [3, 16]. Implisiittisen menetelmän käyttäminen johtaa yleensä epälineaarisen yhtälön ratkaisemiseen eli käytännössä iteratiivisiin menetelmiin [10].

Tavallisen differentiaaliyhtälön tapauksessa epälineaarisen yhtälön ratkaiseminen voidaan kuitenkin kiertää melko helposti. Termille  $y_{i+1}$  voidaan tehdä ennuste edellisen termin  $y_i$  perusteella, sillä  $f(t_i, y_i)$  on approksimaatio  $y$ :n ensimmäiselle derivaatalle pisteessä  $t_i$ . Taylorin sarjan mukaan

$$y(t_{i+1}) = y(t_i) + h f(t_i, y(t_i)) + \frac{h^2}{2} y''(\xi), \quad \xi \in [t_i, t_{i+1}], \quad (40)$$

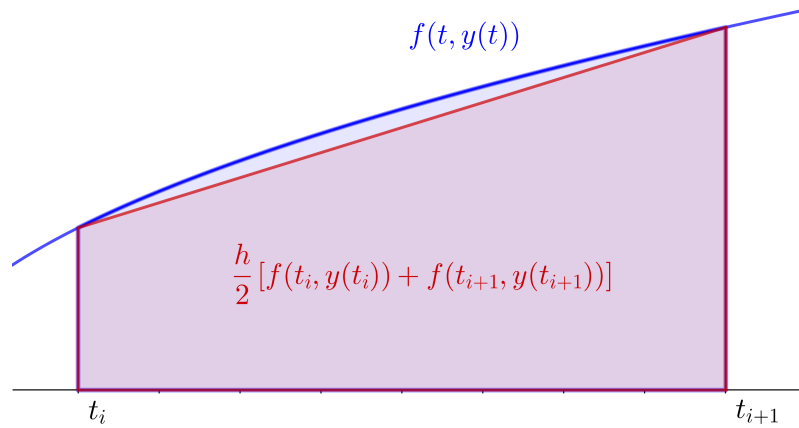
joten  $y_{i+1} \approx y_i + h f(t_i, y_i)$ . Sijoittamalla tämä menetelmän (39) viimeiseen yhtälöön ja merkitsemällä  $k_1 = f(t_i, y_i)$  saadaan **eksplisiittinen keskipistesääntö**,

$$\begin{aligned} y_0 &= y(a) \\ k_1 &= f(t_i, y_i) \\ k_2 &= f(t_{i+1/2}, y_i + \tfrac{h}{2} k_1) \\ y_{i+1} &= y_i + h k_2, \end{aligned} \quad (41)$$

Tämä menetelmä on kaksivaiheinen ja sen kertaluku  $p = 2$  [10, 16].

Kun yhtälön (34) integraalia approksimoidaan puolisuunnikkaan pinta-alalla Kuvan 2 mukaisesti, käytetään puolisuunnikkasääntöä [22]. Tällöin kvadratuurissa on kaksi termiä ja approksimaation (35) mukaan

$$\int_{t_i}^{t_{i+1}} f(s, y(s)) ds \approx h(b_1 k_1 + b_2 k_2) = h[f(t_i, y(t_i)) + f(t_{i+1}, y(t_{i+1}))].$$



Kuva 2. Puolisuunnikassääntö

Nyt selvästi  $b_1 = b_2 = \frac{1}{2}$ ,  $k_1 = f(t_i, y(t_i))$  ja  $k_2 = f(t_{i+1}, y(t_{i+1}))$ . Kun tämä kvadratuuri sijoitetaan yhtälöön (37) äärellisen summan paikalle ja merkitään  $y_i \approx y(t_i)$  saadaan **implisiittinen puolisuunnikassääntö**,

$$\begin{aligned} y_0 &= y(a) \\ k_1 &= f(t_i, y_i) \\ k_2 &= f(t_{i+1}, y_{i+1}) \\ y_{i+1} &= y_i + \frac{h}{2}(k_1 + k_2), \end{aligned} \tag{42}$$

joka on kaksivaiheinen kertalukua  $p = 2$  oleva menetelmä [10, 16].

Tämän menetelmän eksplisiittinen vastine on **Heunin menetelmä** [12]. Menetelmä saadaan, kun implisiittisen menetelmän termi  $y_{i+1}$  korvataan ennusteella  $y_{i+1} \approx y_i + hf(t_i, y_i) = y_i + hk_1$ :

$$\begin{aligned} y_0 &= y(a) \\ k_1 &= f(t_i, y_i) \\ k_2 &= f(t_{i+1}, y_i + hk_1) \\ y_{i+1} &= y_i + \frac{h}{2}(k_1 + k_2). \end{aligned} \tag{43}$$

Tästä menetelmästä käytetään myös nimitystä parannettu Eulerin menetelmä [16] tai muokattu Eulerin menetelmä [6].

## 4.2. Murtodifferentiaaliyhtälöt

Tavallisen differentiaaliyhtälön alkuarvotehtävä (31) voidaan ensimmäisen kertaluvun differentiaalioperaattorin  $D$  avulla esittää muodossa

$$Dy(t) = f(t, y(t)), \quad y_0 = y(a). \tag{44}$$

Vastaavalla esitys tavalla murtodifferentiaaliyhtälön kertalukua  $\alpha$  oleva alkuarvotehtävä Caputo-operaattoria (22) käyttäen on

$$D_{*a}^\alpha y(t) = f(t, y(t)), \quad y_0^{(j)} = D^j y(a), \quad j = 0, 1, 2, \dots, [\alpha] - 1.$$

Käsittelyn ja esittämisen helpottamiseksi jatkossa valitaan alkupisteeksi aina  $a = 0$ , jolloin ratkaistava ongelma on siis

$$D_{*0}^\alpha y(t) = f(t, y(t)), \quad y_0^{(j)} = D^j y(0), \quad j = 0, 1, 2, \dots, [\alpha] - 1. \quad (45)$$

Murtodifferentiaaliyhtälön tapauksessa aikadiskretisointia (33) ei voida käyttää yhtä suoraviivaisesti kuin tavallisen differentiaaliyhtälön tapauksessa. Luvussa 3.3 todettiin, että alkuarvotehtävä (45) voidaan esittää Volterran integraaliyhtälönä

$$y(t) = \sum_{j=0}^{[\alpha]-1} \frac{y_0^{(j)}}{j!} t^j + \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^t (t-s)^{\alpha-1} f(s, y(s)) ds. \quad (46)$$

Tarkastellaan seuraavaksi, miten tämän yhtälön pohjalle on mahdollista rakentaa numeerisia ratkaisumenetelmiä luvussa 4.1.1 ja lähteissä [4, 5, 8] ja [26] esitetyjä ja perusteltuja ideoita käyttäen. Kannatta huomata, että tässä työssä ei esitellä kaikkia edellä mainituissa lähteissä esitettyjä tapoja.

Edellä esitetyn integraaliyhtälön suurin ero tavallisen alkuarvotehtävän vastaavaan yhtälöön (32) on siinä, että integrandi

$$(t-s)^{\alpha-1} f(s, y(s)) \quad (47)$$

riippuu muuttujasta  $t$ , mikä estää integraalin pilkkomisen osiin muuttujan diskretisoinnin (34) mukaisesti. Näin ratkaisua ei voida muodostaa askeltamalla, eli uutta arvoa ei saada lisäyksellä edellisestä arvosta. Ratkaisun  $y(t)$  diskreetteihin arvoihin on kuitenkin mahdollista päästä käsiksi melko suoraviivaisesti.

#### 4.2.1. Paloittain vakio approksimaatio

Approksimoidaan funktiota  $f$  paloittain vakiofunktioilla kaavan (33) mukaisessa hilaissa,  $h = t_{i+1} - t_i$ .

**Määritelmä 8. Laatikkofunktio**  $\psi_j$  määritellään kaavalla

$$\psi_j(t) = \begin{cases} 1, & t \in [t_j, t_{j+1}], \\ 0, & \text{muulloin.} \end{cases} \quad j = 0, 1, 2, \dots, N-1. \quad (48)$$

Funktion  $f$  paloittain vakio approksimaatio  $\tilde{f}$  välillä  $[0, t_{i+1}]$  laatikkofunktion avulla lausuttuna on

$$\tilde{f}(t, y(t)) = \sum_{j=0}^i f(t_j, y(t_j)) \psi_j(t). \quad (49)$$

Tämän esityksen avulla voidaan muodostaa approksimaatio

$$\int_0^{t_{i+1}} (t_{i+1} - s)^{\alpha-1} f(s, y(s)) ds \approx \sum_{j=0}^i f(t_j, y(t_j)) \int_0^{t_{i+1}} (t_{i+1} - s)^{\alpha-1} \psi_j(s) ds, \quad (50)$$

sillä funktion  $f$  ollessa Lipschitz-jatkuva, voidaan arvioida

$$\begin{aligned} \int_0^{t_{i+1}} (t_{i+1} - s)^{\alpha-1} f(s, y(s)) ds &\approx \int_0^{t_{i+1}} (t_{i+1} - s)^{\alpha-1} \tilde{f}(s, y(s)) ds \\ &= \int_0^{t_{i+1}} (t_{i+1} - s)^{\alpha-1} \sum_{j=0}^i f(t_j, y(t_j)) \psi_j(s) ds \\ &= \sum_{j=0}^i f(t_j, y(t_j)) \int_0^{t_{i+1}} (t_{i+1} - s)^{\alpha-1} \psi_j(s) ds. \end{aligned}$$

Laatikkofunktio on nolasta poikkeava vain pienellä alueella  $h$ , jolloin sitä on helppo käsitellä. Merkitään

$$\int_0^{t_{i+1}} (t_{i+1} - s)^{\alpha-1} \psi_j(s) ds = q_{i+1,j}. \quad (51)$$

Kun askelpituus on  $h = t_{i+1} - t_i$ ,

$$\begin{aligned} q_{i+1,j} &= \int_0^{t_{i+1}} (t_{i+1} - s)^{\alpha-1} \psi_j(s) ds = \int_{t_j}^{t_{j+1}} (t_{i+1} - s)^{\alpha-1} ds \\ &= \left/_{t_j}^{t_{j+1}} \frac{(t_{i+1} - s)^\alpha}{\alpha} \right. \\ &= \frac{1}{\alpha} [-(t_{i+1} - t_{j+1})^\alpha + (t_{i+1} - t_j)^\alpha] \\ &= \frac{1}{\alpha} (h^\alpha [(i - j + 1)^\alpha - (i - j)^\alpha]) \\ &= \frac{h^\alpha}{\alpha} [(i - j + 1)^\alpha - (i - j)^\alpha]. \end{aligned}$$

Merkitään  $y_i \approx y(t_i)$  ja  $f_j \approx f(t_j, y(t_j))$ . Integraaliyhtälön (46), approksimaation (50) ja merkinnän (51) perusteella voidaan nyt kirjoittaa esitys diskretisoidulle ratkaisulle

$$y_{i+1} = \sum_{j=0}^{\lceil \alpha \rceil - 1} \frac{y_0^{(j)}}{j!} t_{i+1}^j + \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \sum_{j=0}^i f_j q_{i+1,j}. \quad (52)$$

Tämä esitys on eksplisiittinen ja on ajatukseltaan kaavojen (39) ja (41) keskipistesääntöjen kaltainen. Näissä integraalin approksimaatiossa käytetään myös suorakaideita eli laatikkofunktiota. Merkittävin ero on se, että murtodifferentiaaliyhtälön ratkaiseminen edellyttää aina koko historian ottamista huomioon: Jokaisella askeleella joudutaan käyttämään hyväksi funktion  $f$  kaikkia aikaisempia arvoja. Tämän lisäksi suorakaiteen korkeutta, eli funktion  $f$  arvoa, ei murtodifferentiaaliyhtälön tapauksessa pystytä ennustamaan helposti askeleen puolivälissä, minkä vuoksi suoraa

rinnastusta keskipistesääntöön ei voida tehdä. Tämä menetelmä onkin tarkkuudeltaan heikompi kuin seuraavaksi esiteltävä paloittain lineaariseen approksimaatioon perustuva menetelmä [8].

#### 4.2.2. Paloittain lineaarinen approksimaatio

**Määritelmä 9.** Olkoon  $\phi_j$  sellainen, että

$$\begin{aligned}\phi_0(t) &= \begin{cases} \frac{t_1-t}{h}, & t \in [t_0, t_1], \\ 0, & \text{muulloin.} \end{cases} \\ \phi_j(t) &= \begin{cases} \frac{t-t_{j-1}}{h}, & t \in [t_{j-1}, t_j], \\ \frac{t_{j+1}-t}{h}, & t \in [t_j, t_{j+1}], \\ 0, & \text{muulloin.} \end{cases} \quad j = 1, 2, \dots, N-1, \\ \phi_N(t) &= \begin{cases} \frac{t-t_N}{h}, & t \in [t_{N-1}, t_N], \\ 0, & \text{muulloin.} \end{cases}\end{aligned}\quad (53)$$

Tällä tavalla määriteltyjä funktioita sanotaan **hattufunktioiksi**.

Funktion  $f$  paloittain lineaarinen approksimaatio  $\hat{f}$  välillä  $[0, t_{i+1}]$  on [12]

$$\hat{f}(t, y(t)) = \sum_{j=0}^{i+1} f(t_j, y(t_j)) \phi_j(t). \quad (54)$$

Käyttämällä hyväksi tätä esitystä, voidaan muodostaa approksimaatio

$$\int_0^{t_{i+1}} (t_{i+1} - s)^{\alpha-1} f(s, y(s)) \, ds \approx \sum_{j=0}^{i+1} f(t_j, y(t_j)) \int_0^{t_{i+1}} (t_{i+1} - s)^{\alpha-1} \phi_j(s) \, ds \quad (55)$$

samaan tapaan kuin paloittain vakion approksimaation tapauksessa. Hattufunktio on nolasta poikkeava vain pienellä alueella, joka on leveydeltään korkeintaan  $2h$ . Lisäksi se on paloittain lineaarisena helppo integroitava termin  $(t_{i+1} - s)^{\alpha-1}$  kanssa. Merkitään

$$\int_0^{t_{i+1}} (t_{i+1} - s)^{\alpha-1} \phi_j(s) \, ds = r_{i+1,j}. \quad (56)$$

Kun askelpituus on  $h = t_{i+1} - t_i$ ,

$$\begin{aligned}
r_{i+1,0} &= \int_0^{t_{i+1}} (t_{i+1} - s)^{\alpha-1} \phi_0(s) \, ds = \frac{1}{h} \int_0^{t_1} (t_{i+1} - s)^{\alpha-1} (t_1 - s) \, ds \\
&= \frac{1}{h} \left( \int_0^{t_1} - \frac{(t_{i+1} - s)^\alpha (t_1 - s)}{\alpha} - \int_0^{t_1} \frac{(t_{i+1} - s)^\alpha}{\alpha} \right) \\
&= \frac{1}{h\alpha} \left( (t_{i+1} - 0)^\alpha t_1 + \int_0^{t_1} \frac{(t_{i+1} - s)^{\alpha+1}}{\alpha + 1} \right) \\
&= \frac{1}{h\alpha} \left( h^{\alpha+1} (i+1)^\alpha + \frac{h^{\alpha+1}}{\alpha + 1} [i^{\alpha+1} - (i+1)^{\alpha+1}] \right) \\
&= \frac{h^\alpha}{\alpha(\alpha+1)} [(\alpha+1)(i+1)^\alpha + i^{\alpha+1} - (i+1)(i+1)^\alpha] \\
&= \frac{h^\alpha}{\alpha(\alpha+1)} [i^{\alpha+1} - (i-\alpha)(i+1)^\alpha].
\end{aligned}$$

Vastaavalla tavalla osittaisintegroimalla saadaan myös muut tapaukset  $1 \leq j \leq i+1$  [4]. Näin ollen, kun merkitään  $\beta = \frac{h^\alpha}{\alpha(\alpha+1)}$ , saadaan

$$r_{i+1,j} = \begin{cases} \beta [i^{\alpha+1} - (i-\alpha)(i+1)^\alpha], & j = 0, \\ \beta [(i-j+2)^{\alpha+1} + (i-j)^{\alpha+1} - 2(i-j+1)^{\alpha+1}], & 1 \leq j \leq i, \\ \beta, & j = i+1. \end{cases} \quad (57)$$

Käyttämällä merkintöjä  $y_i \approx y(t_i)$  ja  $f_j \approx f(t_j, y(t_j))$  voidaan diskretisoitu ratkaisu kirjoittaa integraaliyhtälön (46), approksimaation (55) ja merkinnän (56) perusteella muodossa

$$y_{i+1} = \sum_{j=0}^{[\alpha]-1} \frac{y_0^{(j)}}{j!} t_{i+1}^j + \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \sum_{j=0}^{i+1} f_j r_{i+1,j}. \quad (58)$$

Tämä esitys on implisiittinen, sillä arvon  $y_{i+1}$  laskemiseksi tarvitaan tieto arvosta  $f_{i+1} \approx f(t_{i+1}, y(t_{i+1}))$ , joten kyseistä kaavaa ei voida käyttää suoraan. Irrottamalla viimeinen termi kaavan (58) summasta, saadaan

$$y_{i+1} = \sum_{j=0}^{[\alpha]-1} \frac{y_0^{(j)}}{j!} t_{i+1}^j + \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \left( \sum_{j=0}^i f_j r_{i+1,j} + f_{i+1} r_{i+1,i+1} \right). \quad (59)$$

Vertaamalla tätä muotoa implisiittisen puolisuunnikkasäännön kaavaan (42) huomataan, että nämä kaksi muistuttavat toisiaan. Arvon  $f_{i+1} = f(t_{i+1}, y_{i+1})$  selvittämiseksi joudutaan termin  $y_{i+1}$  osalta turvautumaan jonkinlaiseen ennustettuun arvoon  $y_{i+1}^p$  [4, 26] tai käyttämään jotain muuta tapaa.

Luonnollinen lähestymistapa ennusteen  $y_{i+1}^p$  määrittämiseen on käyttää approksimaatiota (52), joka tarjoaa eksplisiittisen tavan arvon  $y_{i+1}$  laskemiseen [4, 8]. Tällöin siis

$$y_{i+1}^p = \sum_{j=0}^{[\alpha]-1} \frac{y_0^{(j)}}{j!} t_{i+1}^j + \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \sum_{j=0}^i f_j q_{i+1,j} \quad (60)$$



ja edelleen

$$y_{i+1} = \sum_{j=0}^{[\alpha]-1} \frac{y_0^{(j)}}{j!} t_{i+1}^j + \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \left( \sum_{j=0}^i f_j r_{i+1,j} + f(t_{i+1}, y_{i+1}^p) r_{i+1,i+1} \right). \quad (61)$$

Käytettäessä implisiittisiä Runge-Kutta menetelmiä tavallisten differentiaaliyhtälöiden tapauksissa, voidaan tietyissä tilanteissa käyttää kiintopisteiteraatiota uuden arvon laskemiseen [1]. Samaa ajatusta on myös mahdollista käyttää murtodifferentiaaliyhtälöiden tapauksessa, jos menetelmän tarkkuutta halutaan parantaa [8].

Kiintopisteiteraatioon perustuva tapa vastauksen tarkentamiseen voidaan esittää seuraavasti. Valitaan alkuarvaukseksi  $y_{i+1}^{[0]} = y_{i+1}^p$  ja edelleen, kun  $m = 1, 2, \dots, M$ ,

$$y_{i+1}^{[m]} = \sum_{j=0}^{[\alpha]-1} \frac{y_0^{(j)}}{j!} t_{i+1}^j + \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \left( \sum_{j=0}^i f_j r_{i+1,j} + f(t_{i+1}, y_{i+1}^{[m-1]}) r_{i+1,i+1} \right), \quad (62)$$

jolloin lopullinen approksimaatio on  $y_{i+1}^{[M]}$ . Edellä esitetyt tavat edellyttävät kaavan (60) mukaisesti askelten mukaan kasvavan summatermin laskemista jokaisella askeleella. Tässä työssä tarkastellaan myös mahdollisuutta valita kiintopisteiteraatioissa alkuarvaukseksi  $y_{i+1}^{[0]} = y_i$ , jolloin säästytään alkuarvauksen summatermin laskemiselta.

## 5. MENETELMIEN VERTAILUA

Edellisessä luvussa esiteltiin muutamia eri tapoja ratkaista murtodifferentiaaliyhtälöitä numeerisesti. Tässä luvussa menetelmiä todellista toimintaa vertaillaan alkuarvotettävillä, joiden analyttinen ratkaisu on myös mahdollista laskea. Näin menetelmien suorituskykyä on helppo arvioida, koska vertailukohtana on tarkka ratkaisu. Menetelmien suoriutumista tarkastellaan eri askelpituuksilla  $h$  ja muuttuvan askelpituuden avulla arvioidaan myös menetelmien suppenemisnopeutta. Lisäksi vertaillaan menetelmien aiheuttamaa laskentakuormaa. Menetelmiä varten luodut ohjelmat ja niiden testaaminen on tehty itse MATLAB-ohjelmistolla [18], lukuun ottamatta Mittag-Leffler-funktion arvoja laskevaa ohjelmaa [9].

### 5.1. Testit

Menetelmiä testattiin neljällä malliongelmalla, joista jokaisesta luotiin kaksi eri versiota käyttäen kertalukuja  $\alpha = \frac{1}{2}$  ja  $\alpha = \frac{3}{2}$ . Kutakin malliongelmaa vastaavat tulokset molemmille kertaluvuille on esitetty vastaavan nimisissä alaluvuissa.

Testatut menetelmät ja niiden tuloksissa käytetyt lyhenteet ovat:

- **Paloittain Vakio Approksimaatio (52), PVA.**  
Tämän menetelmän ohjelmalistaus on Liitteessä 1.
- **Paloittain Lineaarinen Approksimaatio Ennusteella (61), PLAE.**  
Tämän menetelmän ohjelmalistaus on Liitteessä 2.
- **Paloittain Lineaarinen Approksimaatio Iteraatioilla  $M = 1$  (62), PLAI1.**  
Tämän menetelmän ohjelmalistaus on Liitteessä 3.
- **Paloittain Lineaarinen Approksimaatio Iteraatioilla  $M = 2$  (62), PLAI2.**  
Tämän menetelmän ohjelmalistaus on Liitteessä 3.

Jokainen edellä esitetty menetelmä testattiin askelpituuksilla

$$h_j = \frac{1}{10 \cdot 2^{(j-1)}}, \quad j = 1, 2, \dots, 8,$$

tasavälisessä hilassa (33). Menetelmille laskettiin kutakin askelpituutta  $h_j$  vastaava todellinen virhe  $V_j$  laskentavälin päätepisteessä,

$$V_j = |y(t_N) - y_N|. \quad (63)$$

Virhe  $V_j$  esitetään tuloksissa muodossa  $d(p) = d \cdot 10^p$  tilan säästämisen vuoksi. Kannattaa huomata, että paloittain lineaariseen approksimaatioon perustuvissa menetelmissä tuloksia virheen suhteen olisi mahdollista parantaa merkittävästi käyttämällä Richardsonin ekstrapolaatiota [4, 7]. Virheen lisäksi laskettiin arvio suppenemisnopeudelle  $R_j$  askelpituuden suhteen [11],

$$R_j = \frac{\ln(V_{j-1}) - \ln(V_j)}{\ln(h_{j-1}) - \ln(h_j)}, \quad j = 2, 3, \dots, 8. \quad (64)$$

Tuloksissa suppenemisnopeus ilmoitetaan keskiarvona

$$R = \frac{1}{7} \sum_{j=2}^8 R_j. \quad (65)$$

Menetelmien aiheuttaman laskentakuorman tutkimisessa käytettiin MATLAB-ohjelmiston `tic`- ja `toc`-funktioita, joiden avulla voidaan mitata ohjelman suorittamiseen kuluva aika sekunteina.

Koska ohjelman suoritusaikaan saattaa vaikuttaa muu tietokoneen kuormitus, suoritusaika  $t_j^s$  määrättiin valitsemalla kymmenen suorituskerran otoksesta nopein aika. Samasta syystä suoritusaajan osalta ei esitetä tuloksia, jotka ovat pienempiä kuin 1 ms. Testaaminen tehtiin tietokoneella, jossa on Intel Core i5-6300, 2,5 GHz - prosessori ja 8 GB muistia. Kannattaa huomata, että suoritusaajan mittauksesta saadut tulokset ovat vain suuntaa antavia mittauksen epävarmuuteen liittyvistä tekijöistä johtuen, vaikka suurimmat ongelmat onkin pyritty kumoamaan toistamalla mittauksia. Menetelmien optimointia ja laskentakuormaa on pohdittu tarkemmin lähteessä [7].

## 5.2. Malliongelma 1

Ensimmäinen malliongelma on homogeeninen Cauchy-tyyppinen ongelma

$$D_{*0}^\alpha y(t) = y(t), \quad y(0) = 1, \quad 0 \leq t \leq 1, \quad (66)$$

kun  $\alpha = \frac{1}{2}$ . Kun  $\alpha = \frac{3}{2}$  käytössä on lisäksi alkuehto  $y'(0) = 1$ . Kertaluvun  $\alpha = \frac{1}{2}$  tapauksessa ratkaisu on helposti määrättävissä, sillä Lauseen 7 mukaan,

$$D_{*0}^\alpha E_{\alpha,1}(\lambda t^\alpha) = \lambda E_{\alpha,1}(\lambda t^\alpha).$$

Vertaamalla tätä ongelmaan (66) huomataan, että nyt  $\lambda = 1$ . Käyttämällä lisäksi kaavaa (8) saadaan

$$y(t) = E_{\frac{1}{2},1}(t^{\frac{1}{2}}) = e^t \operatorname{erfc}(-\sqrt{t}), \quad (67)$$

joka on siis tämän malliongelman alkuehdon toteuttava analyyttinen ratkaisu, sillä

$$y(0) = E_{\frac{1}{2},1}(0) = 1.$$

Tämä ratkaisu noudattaa myös Lauseen 9 tulosta.

Kun  $\alpha = \frac{3}{2}$ , alkuehdot toteuttava ratkaisu on puolestaan edellä esitettyä ratkaisua vastaavan termin (67) ja korkeamman derivaatan kertaluvun aiheuttaman lisätermin lineaariyhdistelmä Lauseen 9 mukaan,

$$y(t) = E_{\frac{3}{2},1}(t^{\frac{3}{2}}) + t E_{\frac{3}{2},2}(t^{\frac{3}{2}}). \quad (68)$$

Testattuja menetelmiä vastaavat tulokset tälle malliongelmalle on esitetty Taulukoissa 1 ja 2.

Tuloksista voidaan välittömästi havaita, että PVA-menetelmä on tarkkuudeltaan selvästi heikoin molemmilla kertaluvun  $\alpha$  arvoilla. Se on toisaalta myös laskennallisesti kevyin suoritusaajan perusteella kuten kuuluukin olla, mutta vain pienellä

$h_j$	PVA		PLAE		PLAI1		PLAI2	
	$V_j$	$t_j^s$ [s]	$V_j$	$t_j^s$ [s]	$V_j$	$t_j^s$ [s]	$V_j$	$t_j^s$ [s]
1/10	7,72(-1)	-	1,91(-1)	-	4,46(-1)	-	1,10(-1)	-
1/20	4,14(-1)	-	7,32(-2)	-	1,77(-1)	-	3,44(-2)	-
1/40	2,12(-1)	0,001	2,70(-2)	0,002	6,61(-2)	0,002	1,05(-2)	0,001
1/80	1,06(-1)	0,002	9,81(-3)	0,005	2,40(-2)	0,006	3,23(-3)	0,004
1/160	5,28(-2)	0,005	3,53(-3)	0,016	8,58(-3)	0,012	1,01(-3)	0,012
1/320	2,61(-2)	0,015	1,26(-3)	0,054	3,05(-3)	0,040	3,21(-4)	0,041
1/640	1,30(-2)	0,091	4,49(-4)	0,295	1,08(-3)	0,166	1,04(-4)	0,175
1/1280	6,44(-3)	0,939	1,59(-4)	2,269	3,84(-4)	1,166	3,45(-5)	1,165
$R$	0,99		1,46		1,45		1,65	

Taulukko 1. Malliongelman 1 tulokset, kun  $\alpha = \frac{1}{2}$  ja  $j = 1, 2, \dots, 8$ .

$h_j$	PVA		PLAE		PLAI1		PLAI2	
	$V_j$	$t_j^s$ [s]	$V_j$	$t_j^s$ [s]	$V_j$	$t_j^s$ [s]	$V_j$	$t_j^s$ [s]
1/10	8,49(-2)	-	1,09(-3)	-	2,95(-3)	-	1,89(-3)	-
1/20	4,42(-2)	-	3,38(-4)	0,001	4,04(-4)	-	4,88(-4)	-
1/40	2,26(-2)	0,002	9,67(-5)	0,003	3,71(-5)	0,002	1,24(-4)	0,002
1/80	1,14(-2)	0,005	2,64(-5)	0,007	2,50(-6)	0,007	3,12(-5)	0,005
1/160	5,74(-3)	0,010	6,99(-6)	0,022	2,75(-6)	0,014	7,84(-6)	0,013
1/320	2,88(-3)	0,034	1,82(-6)	0,074	1,07(-6)	0,044	1,97(-6)	0,045
1/640	1,44(-3)	0,152	4,67(-7)	0,361	3,34(-7)	0,177	4,93(-7)	0,182
1/1280	7,21(-4)	1,108	1,19(-7)	2,417	9,53(-8)	1,167	1,24(-7)	1,174
$R$	0,98		1,88		2,13		1,99	

Taulukko 2. Malliongelman 1 tulokset, kun  $\alpha = \frac{3}{2}$  ja  $j = 1, 2, \dots, 8$ .

erolla PLAI1 ja PLAI2 -menetelmiin. Menetelmät PLAE ja PLAI1 ovat tarkkuudeltaan suurin piirtein samalla tasolla, jos tarkastellaan molempia testejä kokonaisuutena. PLAI2-menetelmä on selkeästi tarkin, kun  $\alpha = \frac{1}{2}$  ja samalla tasolla muiden lineaariseen approksimaatioon perustuvien menetelmien kanssa, kun  $\alpha = \frac{3}{2}$ .

Teorian mukaan suppenemisnopeus kuuluisi paloittain lineaarista approksimaatiota käytettäessä olla korkeintaan  $\min\{2, 1 + \alpha\}$  [4]. Tulosten perusteella näyttääkin siltä, että approksimoitu suppenemisnopeus  $R$  noudattaa tätä hyvin molemmilla kertaluvun arvoilla. PVA-menetelmän arvioitu suppenemisnopeus jää kummassakin testeissä pienemmäksi kuin yksi. Jossain määrin yllättävää on se, että PLAE-menetelmän suoritusajat ovat liki kaksinkertaisia ( $\sim 2,3 - 2,4$  s) lyhyimmällä askelpituudella PLAI1- ja PLAI2-menetelmiin verrattuna ( $\sim 1,2$  s). Ennusteen laskeminen PLAE-menetelmässä on laskentakuormituksen kannalta siis hyvin merkittävä tekijä. Suoritusajoissa näkyy myös selvästi se, kuinka laskenta-aika kasvaa voimakkaammin kuin laskentapisteidien määrä. Tämä on seurausta siitä, että Caputo-

operaattori ei ole paikallinen ja uutta arvoa laskettaessa kaikki aiemmat arvot ovat laskennassa mukana.

### 5.3. Malliongelma 2

Toinen malliongelma on epähomogeeninen Cauchy-tyyppinen ongelma

$$D_{*0}^{\alpha}y(t) = y(t) + \sin(10t), \quad y(0) = 1, \quad 0 \leq t \leq 1, \quad (69)$$

kun  $\alpha = \frac{1}{2}$ . Kertaluvun ollessa  $\alpha = \frac{3}{2}$  käytössä on lisäksi alkuehto  $y'(0) = 1$  samalla tavalla kuin Malliongelmassa 1. Kun  $\alpha = \frac{1}{2}$ , tämän malliongelman ratkaisu on Lauseen 9 mukaan homogeenisen yhtälön ratkaisun (67) ja häiriön aiheuttaman integraalin lineaariyhdistely,

$$y(t) = E_{\frac{1}{2},1}(t^{\frac{1}{2}}) + \int_0^t (t-s)^{-\frac{1}{2}} E_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}[(t-s)^{\frac{1}{2}}] \sin(10s) \, ds \quad (70)$$

ja tapauksessa  $\alpha = \frac{3}{2}$  ratkaisu on vastaavasti

$$y(t) = E_{\frac{3}{2},1}(t^{\frac{3}{2}}) + tE_{\frac{3}{2},2}(t^{\frac{3}{2}}) + \int_0^t (t-s)^{\frac{1}{2}} E_{\frac{3}{2},\frac{3}{2}}[(t-s)^{\frac{3}{2}}] \sin(10s) \, ds. \quad (71)$$

Malliongelman 2 tulokset kertaluvulle  $\alpha = \frac{1}{2}$  on esitetty Taulukossa 3 ja kertaluvulle  $\alpha = \frac{3}{2}$  Taulukossa 4.

$h_j$	PVA		PLAE		PLAI1		PLAI2	
	$V_j$	$t_j^s$ [s]	$V_j$	$t_j^s$ [s]	$V_j$	$t_j^s$ [s]	$V_j$	$t_j^s$ [s]
1/10	8,06(−1)	-	2,53(−1)	-	5,61(−1)	-	1,90(−1)	-
1/20	4,08(−1)	-	8,70(−2)	-	2,02(−1)	-	5,31(−2)	-
1/40	2,05(−1)	-	3,02(−2)	0,002	7,13(−2)	0,001	1,50(−2)	0,002
1/80	1,02(−1)	0,002	1,05(−2)	0,005	2,50(−2)	0,004	4,34(−3)	0,004
1/160	5,10(−2)	0,004	3,69(−3)	0,014	8,80(−3)	0,012	1,28(−3)	0,013
1/320	2,54(−2)	0,015	1,29(−3)	0,052	3,09(−3)	0,039	3,90(−4)	0,041
1/640	1,26(−2)	0,089	4,55(−4)	0,298	1,09(−3)	0,172	1,21(−4)	0,174
1/1280	6,28(−3)	0,932	1,60(−4)	2,229	3,84(−4)	1,150	3,88(−5)	1,166
$R$	1,00		1,52		1,50		1,75	

Taulukko 3. Malliongelman 2 tulokset, kun  $\alpha = \frac{1}{2}$  ja  $j = 1, 2, \dots, 8$ .

Kun Malliongelman 2 tuloksia verrataan Malliongelman 1 tuloksiin, huomataan, että häiriötermi  $\sin(10t)$  ei vaikuta menetelmien suoriutumiseen tarkkuuden tai laskenta-ajan suhteen. Tulokset ovat muutenkin hyvin yhteneväiset Malliongelman 1 tulosten kanssa. Molempien malliongelmien kohdalla on myös selvästi havaittavissa, että kertaluvun kasvattaminen johtaa siihen, että kaikki numeeriset ratkaisualgoritmit suoriutuvat tehtävästä selkeästi paremmin virhettä tarkasteltaessa. Näin toki kuuluukin olla, sillä korkeamman kertaluvun tapauksessa ratkaisun (26) integraali-termi on sileämpi [4].

$h_j$	PVA		PLAE		PLAI1		PLAI2	
	$V_j$	$t_j^s$ [s]	$V_j$	$t_j^s$ [s]	$V_j$	$t_j^s$ [s]	$V_j$	$t_j^s$ [s]
1/10	1,22(-1)	-	1,57(-2)	-	2,00(-2)	-	1,47(-2)	-
1/20	5,91(-2)	-	3,81(-3)	0,001	4,60(-3)	-	3,62(-3)	-
1/40	2,91(-2)	0,002	9,36(-4)	0,002	1,08(-3)	0,002	9,02(-4)	0,002
1/80	1,44(-2)	0,003	2,31(-4)	0,006	2,56(-4)	0,005	2,25(-4)	0,005
1/160	7,17(-3)	0,010	5,73(-5)	0,020	6,18(-5)	0,014	5,63(-5)	0,015
1/320	3,58(-3)	0,034	1,42(-5)	0,071	1,50(-5)	0,043	1,41(-5)	0,045
1/640	1,79(-3)	0,149	3,55(-6)	0,362	3,69(-6)	0,181	3,51(-6)	0,179
1/1280	8,92(-4)	1,112	8,84(-7)	2,401	9,08(-7)	1,171	8,78(-7)	1,181
$R$	1,01		2,02		2,06		2,00	

Taulukko 4. Malliongelman 2 tulokset, kun  $\alpha = \frac{3}{2}$  ja  $j = 1, 2, \dots, 8$ .

### 5.4. Malliongelma 3

Kolmas tämän työn testeissä käytetty malliongelma on johdettu lähteissä [4] ja [8] käytetystä ongelmasta poistamalla siitä epälineaarinen osa. Malliongelma on

$$D_{*0}^\alpha y(t) = \frac{40320}{\Gamma(9-\alpha)} t^{8-\alpha} - \frac{3\Gamma(5+\frac{\alpha}{2})}{\Gamma(5-\frac{\alpha}{2})} t^{4-\frac{\alpha}{2}} + \frac{9}{4}\Gamma(\alpha-1), \quad 0 \leq t \leq 1, \quad (72)$$

alkuehdolla  $y(0) = 0$ , kun  $\alpha = \frac{1}{2}$  ja lisäksi, kun  $\alpha = \frac{3}{2}$ ,  $y'(0) = 0$ .

Ratkaisu tälle malliongelmalle on Lauseen 10 ja Caputon derivaatan lineaarisuuden perusteella

$$y(t) = t^8 - 3t^{4+\frac{\alpha}{2}} + \frac{9}{4}t^\alpha. \quad (73)$$

Malliongelman 3 testaamisesta saadut tulokset on esitelty Taulukoissa 5 ja 6.

$h_j$	PVA		PLAE		PLAI1		PLAI2	
	$V_j$	$t_j^s$ [s]	$V_j$	$t_j^s$ [s]	$V_j$	$t_j^s$ [s]	$V_j$	$t_j^s$ [s]
1/10	2,17(-1)	-	6,74(-3)	-	6,74(-3)	-	6,74(-3)	-
1/20	1,15(-1)	-	2,15(-3)	0,001	2,15(-3)	-	2,15(-3)	-
1/40	6,51(-2)	0,001	6,09(-4)	0,002	6,09(-4)	0,002	6,09(-4)	0,002
1/80	4,06(-2)	0,002	1,64(-4)	0,005	1,64(-4)	0,004	1,64(-4)	0,005
1/160	2,84(-2)	0,005	4,29(-5)	0,015	4,29(-5)	0,012	4,29(-5)	0,013
1/320	2,23(-2)	0,015	1,11(-5)	0,055	1,11(-5)	0,041	1,11(-5)	0,044
1/640	1,93(-2)	0,089	2,82(-6)	0,305	2,82(-6)	0,176	2,82(-6)	0,183
1/1280	1,77(-2)	0,946	7,16(-7)	2,237	7,16(-7)	1,162	7,16(-7)	1,176
$R$	1,01		2,02		2,06		2,00	

Taulukko 5. Malliongelman 3 tulokset, kun  $\alpha = \frac{1}{2}$  ja  $j = 1, 2, \dots, 8$ .

$h_j$	PVA		PLAE		PLAI1		PLAI2	
	$V_j$	$t_j^s$ [s]	$V_j$	$t_j^s$ [s]	$V_j$	$t_j^s$ [s]	$V_j$	$t_j^s$ [s]
1/10	3,08(-1)	-	2,83(-3)	-	2,83(-3)	-	2,83(-3)	-
1/20	1,56(-1)	-	5,92(-4)	0,001	5,92(-4)	-	5,92(-4)	-
1/40	7,82(-2)	0,002	1,38(-4)	0,003	1,38(-4)	0,002	1,38(-4)	0,002
1/80	3,91(-2)	0,004	3,38(-5)	0,007	3,38(-5)	0,005	3,38(-5)	0,006
1/160	1,95(-2)	0,011	8,37(-6)	0,020	8,37(-6)	0,013	8,37(-6)	0,015
1/320	9,77(-3)	0,035	2,09(-6)	0,075	2,09(-6)	0,045	2,09(-6)	0,048
1/640	4,88(-3)	0,154	5,22(-7)	0,369	5,22(-7)	0,184	5,22(-7)	0,193
1/1280	2,44(-3)	1,126	1,30(-7)	2,420	1,30(-7)	1,191	1,30(-7)	1,195
$R$	1,01		2,02		2,06		2,00	

Taulukko 6. Malliongelman 3 tulokset, kun  $\alpha = \frac{3}{2}$  ja  $j = 1, 2, \dots, 8$ .

Tuloksista huomataan, että lineaariseen approksimaatioon perustuvat menetelmät suoriutuvat identtisesti tämän tyyppisestä ongelmasta. Tämä on luonnollista, sillä menetelmien erot löytyvät siitä, miten arvoa  $f_{i+1} = f(t_{i+1}, y_{i+1})$ , ja tarkemmin vielä termiä  $y_{i+1}$ , approksimoidaan implisiittisessä esityksessä kaavassa (59). Tässä ongelmassa  $f$  ei riipu ratkaisusta  $y$ , joten kaikki menetelmä antavat saman tuloksen. PVA-menetelmä on tässäkin tapauksessa tarkkuudeltaan heikoin. Suoritusajoissa on samanlaiset erot kuin aiemmissakin testeissä. Algoritmeja olisi mahdollista optimoida siten, että tilanteissa, joissa  $f$  ei riipu ratkaisusta  $y$ , sen laskeminen ohitettaisiin kokonaan. Tällöin myös suoritusajat olisivat samat.

### 5.5. Malliongelma 4

Viimeisenä malliongelmana on lähteissä [4] ja [8] numeeristen ratkaisualgoritmien testaamisessa käytetty epälineaarinen ongelma

$$D_{*0}^\alpha y(t) = \frac{40320}{\Gamma(9-\alpha)} t^{8-\alpha} - \frac{3\Gamma(5+\frac{\alpha}{2})}{\Gamma(5-\frac{\alpha}{2})} t^{4-\frac{\alpha}{2}} + \frac{9}{4}\Gamma(\alpha-1) + \left(\frac{3}{2}t^{\frac{\alpha}{2}} - t^4\right)^3 - [y(t)]^{\frac{3}{2}}, \quad 0 \leq t \leq 1, \quad (74)$$

alkuehdolla  $y(0) = 0$ , kun  $\alpha = \frac{1}{2}$  ja, kun  $\alpha = \frac{3}{2}$ ,  $y'(0) = 0$ .

Tämän ongelman ratkaisu on hieman yllättäen täsmälleen sama kuin Malliongelmassa 3. Ratkaisu on siis (73), eli

$$y(t) = t^8 - 3t^{4+\frac{\alpha}{2}} + \frac{9}{4}t^\alpha.$$

Tämä voidaan perustella seuraavasti. Nyt (73) on selvästi aina positiivinen ja välillä  $[0, 1]$  myös  $\frac{3}{2}t^{\frac{\alpha}{2}} - t^4 \geq 0$ , joten

$$\begin{aligned} \left[ \left( \frac{3}{2}t^{\frac{\alpha}{2}} - t^4 \right)^3 \right]^2 &= \left[ \left( \frac{3}{2}t^{\frac{\alpha}{2}} - t^4 \right)^2 \right]^3 \\ &= \left( \frac{9}{4}t^{\alpha} - 3t^{4+\frac{\alpha}{2}} + t^8 \right)^3 \\ &= [y(t)]^3 \\ \Leftrightarrow \left( \frac{3}{2}t^{\frac{\alpha}{2}} - t^4 \right)^3 &= [y(t)]^{\frac{3}{2}}. \end{aligned}$$

Nämä termit siis kumoavat toisensa yhtälön (74) oikealla puolella, jolloin ratkaisu on sama kuin Malliongelmassa 3. Epälineaarinen osa vaikeuttaa kuitenkin numeeristen laskenta-algoritmien toimintaa, kuten tullaan huomaamaan tuloksista.

Malliongelman 4 testaamisesta saadut tulokset on esitelty Taulukoissa 7 ja 8.

$h_j$	PVA		PLAE		PLAI1		PLAI2	
	$V_j$	$t_j^s$ [s]	$V_j$	$t_j^s$ [s]	$V_j$	$t_j^s$ [s]	$V_j$	$t_j^s$ [s]
1/10	1,35(-1)	-	1,79(-2)	-	3,65(-2)	-	1,57(-2)	-
1/20	6,31(-2)	-	1,81(-3)	-	1,11(-2)	-	3,39(-3)	-
1/40	3,06(-2)	-	4,16(-4)	0,002	3,51(-3)	0,002	8,06(-4)	0,002
1/80	1,51(-2)	0,002	1,77(-4)	0,005	1,17(-3)	0,004	2,00(-4)	0,005
1/160	7,51(-3)	0,005	7,98(-5)	0,015	4,02(-4)	0,012	5,05(-5)	0,013
1/320	3,75(-3)	0,018	3,39(-5)	0,054	1,42(-4)	0,042	1,28(-5)	0,045
1/640	1,88(-3)	0,091	1,36(-5)	0,306	5,04(-5)	0,182	3,23(-6)	0,180
1/1280	9,39(-4)	0,933	5,24(-6)	2,248	1,79(-5)	1,166	8,16(-7)	1,179
$R$	1,02		1,68		1,57		2,03	

Taulukko 7. Malliongelman 4 tulokset, kun  $\alpha = \frac{1}{2}$  ja  $j = 1, 2, \dots, 8$ .

$h_j$	PVA		PLAE		PLAI1		PLAI2	
	$V_j$	$t_j^s$ [s]	$V_j$	$t_j^s$ [s]	$V_j$	$t_j^s$ [s]	$V_j$	$t_j^s$ [s]
1/10	2,67(-1)	-	4,13(-3)	-	3,56(-3)	-	6,31(-3)	-
1/20	1,32(-1)	-	1,13(-3)	0,001	1,00(-3)	-	1,47(-3)	0,001
1/40	6,57(-2)	0,002	3,02(-4)	0,003	2,80(-4)	0,002	3,57(-4)	0,002
1/80	3,27(-2)	0,004	7,92(-5)	0,007	7,54(-5)	0,005	8,86(-5)	0,006
1/160	1,63(-2)	0,011	2,05(-5)	0,021	1,98(-5)	0,014	2,21(-5)	0,016
1/320	8,13(-3)	0,037	5,23(-6)	0,074	5,12(-6)	0,046	5,51(-6)	0,049
1/640	4,06(-3)	0,152	1,33(-6)	0,369	1,31(-6)	0,188	1,38(-6)	0,195
1/1280	2,03(-3)	1,120	3,36(-7)	2,420	3,32(-7)	1,198	3,45(-7)	1,207
$R$	1,01		1,94		1,91		2,02	

Taulukko 8. Malliongelman 4 tulokset, kun  $\alpha = \frac{3}{2}$  ja  $j = 1, 2, \dots, 8$ .



Malliongelmien 3 ja 4 ratkaisu on sama, mutta numeeristen algoritmien tulokset poikkeavat merkittävästi toisistaan. Kun  $\alpha = \frac{1}{2}$ , PLAI2-menetelmä antaa tarkkuudeltaan selvästi parhaat tulokset laskenta-ajan ollessa noin puolet PLAE-menetelmästä. Ero on jopa niin selvä, että PLAI2-menetelmän antama tulos askelpituudella  $1/640$  on parempi kuin toisten menetelmien tulokset askelpituudella  $1/1240$ . Ero näkyy melko selvästi myös suppenemisnopeudessa. Kun kertaluku  $\alpha = \frac{3}{2}$ , erot tarkkuudessa tasoittuvat ja kaikki lineaariseen approksimaatioon perustuvat menetelmät ovat suurin piirtein yhtä tarkkoja kaikilla askelpituuksilla. Myös suppenemisnopeudet ovat yhteneväisiä.

## 6. YHTEENVETO

Tämän tutkielman tarkoituksena oli perehtyä ja perehdyttää lukija suoraviivaisesti murtodifferentiaaliyhtälöiden numeeriseen ratkaisemiseen ja taustalla olevaan teoriaan. Ratkaisumenetelmät tähän työhön on valikoitu siten, että niiden teoreettinen perusteleminen ei vaadi kohtuutonta määrää taustatietoja, mutta kuitenkin niin, että ne ovat käyttökelpoisia ja perustuvat kohtuullisen tuoreeseen tutkimukseen [4, 5]. Kannattaa kuitenkin huomata, että numeerisia ratkaisutekniikoita murtodifferentiaaliyhtälöille on paljon muitakin kuin tässä työssä esitetyt tavat [2, 8, 26].

Kuten johdantoluvussa todettiin, murtodifferentiaaliyhtälöllä voidaan mallintaa ilmiöitä, jotka pitävät sisällään muistia. Tämä sama ilmiö on läsnä myös numeerisissa ratkaisutavoissa, joissa historian huomioiminen lisää laskentakuormaa jokaisella askeleella laskennan edetessä. Tavallisten differentiaaliyhtälöiden tapauksessa historia voidaan unohtaa ja jokaisella askeleella laskutoimituksia on käytännössä yhtä paljon. Nämä seikat nousivat myös keskeisimmiksi havainnoiksi tämän työn luvussa 4, jossa tutkittiin ja vertailtiin murtodifferentiaaliyhtälöiden ja tavallisten differentiaaliyhtälöiden numeerisia ratkaisutapoja. Sisältönsä puolesta tätä lukua voidaan pitää myös tämän tutkielman olennaisimpana osana, joten nämä havainnot ovat koko työn kannalta erittäin merkityksellisiä.

Osana tätä tutkielmaa kehitettiin myös algoritmit luvussa 4 esitetyille murtodifferentiaaliyhtälöiden ratkaisumenetelmille. Näiden algoritmien avulla oli mahdollista tutkia menetelmien suorituskykyä niin tarkkuuden kuin nopeudenkin osalta. Tämä luvussa 5 tehty menetelmien vertailu ja tulosten analysointi muodostavat myös keskeisen osan tätä työtä. Vertailussa käytettiin neljää erilaista menetelmää eri askelpituuksilla ja menetelmiä sovellettiin useisiin erityyppisiin testiongelmiin. Tulosten perusteella voitiin tehdä muutamia erityisen tärkeitä havaintoja. Ensimmäinen merkittävä havainto oli ja on, että murtodifferentiaaliyhtälön kertaluvun  $\alpha$  muuttaminen vaikuttaa ratkaisevasti menetelmien tarkkuuteen. Tarkkuus paranee selkeästi kertaluvun kasvaessa. Toinen tärkeä havainto tulosten perusteella oli, että pienillä muutoksilla algoritmeissa voidaan saavuttaa merkittäviä eroja nopeudessa. Kolmantena keskeisenä havaintona voitaneen pitää sitä, että menetelmien suppenemisnopeudet noudattivat varsin hyvin teoreettista mallia. Tarkemmat selitykset näistä havainnoista löytyvät mittaustulosten yhteydestä luvusta 5.

Toivon, että tämä tutkielma antaa lukijalleen mielekkään lähtökohdan tutustua murtodifferentiaaliyhtälöiden numeeriseen ratkaisemiseen. Murtodifferentiaaliyhtälöt ovat kuitenkin ihan kivoja.

## 7. LÄHTEET

- [1] M. Antoñana, J. Makazaga, and A. Murua. Efficient implementation of symplectic implicit runge-kutta schemes with simplified newton iterations. *Numerical Algorithms*, 78(1):63–86, 2018.
- [2] P. Assari and S. Cuomo. The numerical solution of fractional differential equations using the volterra integral equation method based on thin plate splines. *Engineering with Computers*, 35(4):1391–1408, 2019.
- [3] J. Butcher. A history of runge-kutta methods. *Applied Numerical Mathematics*, 20(3):247 – 260, 1996.
- [4] K. Diethelm. *The analysis of fractional differential equations: An application-oriented exposition using differential operators of Caputo type*. Springer Berlin Heidelberg, 2010.
- [5] K. Diethelm, R. Garrappa, and M. Stynes. Good (and not so good) practices in computational methods for fractional calculus. *Mathematics*, 8(3), 2020.
- [6] J. D. Faires and R. Burden. *Numerical Methods*. Brooks/Cole Publishing Company, 1998.
- [7] N. J. Ford and A. C. Simpson. The numerical solution of fractional differential equations: speed versus accuracy. *Numerical Algorithms*, 26(4):333–346, 2001.
- [8] R. Garrappa. Numerical solution of fractional differential equations: A survey and a software tutorial. *Mathematics*, 6(2):16, 2018.
- [9] R. Garrappa. The mittag-leffler function. *MATLAB Central File Exchange*, 2020.
- [10] A. Greenbaum and T. P. Chartier. *Numerical methods: design, analysis, and computer implementation of algorithms*. Princeton University Press, 2012.
- [11] K. Gustafsson. *Control of error and convergence in ODE solvers*. PhD thesis, Lund Institute of Technology, 1992.
- [12] J. Haataja, J. Heikonen, Y. Leino, J. Rahola, J. Ruokolainen, and V. Savolainen. *Numeeriset menetelmät käytännössä*. Tieteen tietotekniikan keskus CSC, Picaset Oy, Helsinki, 2002.
- [13] H. Halinen. *Johdatus fraktaaliderivaattoihin ja niiden sovelluksiin*. Pro gradu -tutkielma, Jyväskylän yliopisto, Matematiikan ja tilastotieteen laitos, 2014.
- [14] J. Kemppainen. *Johdatus fraktionaaliseen analyysiin*. Matematiikan jaos, Oulun yliopisto, 2014.
- [15] A. A. A. Kilbas, H. M. Srivastava, and J. J. Trujillo. *Theory and applications of fractional differential equations*, volume 204. Elsevier Science Limited, 2006.

- [16] J. D. Lambert. *Numerical Methods for Ordinary Differential Systems: The Initial Value Problem*. John Wiley & Sons, Inc., 1991.
- [17] A. Mathai and H. J. Haubold. Mittag-leffler functions and fractional calculus. *Special Functions for Applied Scientists*, pages 79–134, 2008.
- [18] MATLAB. *Version 9.5 (R2018b)*. The MathWorks Inc., Natick, Massachusetts, 2018.
- [19] H. Nasrolahpour. Time fractional formalism: Classical and quantum phenomena. *arXiv:1203.4515 [physics.gen-ph]*, 2012.
- [20] K. Oldham and J. Spanier. *The fractional calculus theory and applications of differentiation and integration to arbitrary order*. Dover Publications, 2006.
- [21] O. Ozturk Mizrak, C. Mizrak, A. Kashkynbayev, and Y. Kuang. Can fractional differentiation improve stability results and data fitting ability of a prostate cancer model under intermittent androgen suppression therapy? *Chaos, Solitons & Fractals*, 131:109529, 2020.
- [22] J. Pitkäranta. *Calculus fennicus*. Avoimet oppimateriaalit ry, Helsinki, 2015.
- [23] A. Sard. Integral representations of remainders. *Duke Math. J.*, 15(2):333–345, 06 1948.
- [24] P. Van Mieghem. The mittag-leffler function. *arXiv:2005.13330 [math.FA]*, 2020.
- [25] P. Veerasha, D. Prakasha, and H. M. Baskonus. New numerical surfaces to the mathematical model of cancer chemotherapy effect in caputo fractional derivatives. *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, 29(1):013119, 2019.
- [26] M. Weilbeer. *Efficient numerical methods for fractional differential equations and their analytical background*. PhD thesis, Technical University of Braunschweig, 2005.

## **LIITTEET**

Liite 1. Matlab-ohjelma `fde_pr.m`, joka toteuttaa PVA-menetelmän.

Liite 2. Matlab-ohjelma `fde_ptwp.m`, joka toteuttaa PLAE-menetelmän.

Liite 3. Matlab-ohjelma `fde_ptwi.m`, joka toteuttaa PLAI-menetelmät.

**fde\_pr.m**

```
function [y] = fde_pr(alp,f,h,y0,interval)
%fde_pr() implements a fractional differential equation
%solver for equation  $D^{\text{alp}} y = f(t,y)$  using step size h
%and initial conditions y0 within interval.
%The integrals are computed using piecewise constant
%approximations.
%INPUT
%alp = the order of differentiation, alp>0
%f = the right hand side of the equation as a function
%handle @f
%h = step size
%y0 = initial conditions as a column vector
%interval = the interval for which the solution is
%computed as a vector
%OUTPUT
%y = the solution for the problem
%
%Lassi Korhonen, University of Oulu,
%Applied and Computational Mathematics, 2020

t_0 = interval(1);
t_n = interval(2);
N = floor((t_n-t_0)/h);
t = t_0:h:t_n;
y(1)=y0(1);
ft(1) = f(0,y0(1));
m = ceil(alp);

for k = 0:N-1

    %weights for piecewise integrals
    j = 1:k;
    b(1,k+1) = h^alp/alp*((k+1)^alp-k^alp);
    b(2:k+1,k+1) = h^alp/alp*((k+1-j).^alp-(k-j).^alp);

    %Taylor polynomial for initial conditions
    tkj = ones(1,m).*t(k+2).^(0:m-1)./(factorial((0:m-1)));
    T = tkj*y0;

    %Next value for y
    y(k+2) = T+1/(gamma(alp))*b(1:k+1,k+1)'*ft';

    %Update ft
    ft(k+2) = f(t(k+2),y(k+2));
end
```

**fde\_ptwp.m**

```

function [y] = fde_ptwp(alp,f,h,y0,interval)
%fde_ptwp() implements a fractional differential equation
solver for equation  $D^{\text{alp}} y = f(t,y)$  using step size h and
%initial conditions y0 within interval.
%The integrals are computed using piecewise linear
%approximations with predictor.
%INPUT
%alp = the order of differentiation, alp>0
%f = the right hand side of the equation as a function
%handle @f
%h = step size
%y0 = initial conditions as a column vector
%interval = the interval for which the solution is
%computed as a vector
%OUTPUT
%y = the solution for the problem
%
%Lassi Korhonen, University of Oulu,
%Applied and Computational Mathematics, 2020

t_0 = interval(1);
t_n = interval(2);
N = floor((t_n-t_0)/h);
t = t_0:h:t_n;
y(1)=y0(1);
ft(1) = f(0,y0(1));
m = ceil(alp);

for k = 0:N-1

    %weights for piecewise integrals
    a(1,k+1) = h^alp/(alp*(alp+1))*(k^(alp+1)-(k-alp)...
    *(k+1)^alp);
    b(1,k+1) = h^alp/alp*((k+1)^alp-k^alp);
    if k >= 1
        j = 1:k;
        a(2:k+1,k+1) = h^alp/(alp*(alp+1))*((k-j+2)...
        .^(alp+1)+(k-j).^(alp+1)-2*(k-j+1).^(alp+1));
        b(2:k+1,k+1) = h^alp/alp*((k+1-j).^alp-(k-j).^alp);
    end
    a(k+2,k+1) = h^alp/(alp*(alp+1));

    %Taylor polynomial for initial conditions
    tkj = ones(1,m).*t(k+2).^(0:m-1)./(factorial((0:m-1)));
    T = tkj*y0;

```

## *Liite 2*

```
%predictor
yp = T+1/(gamma(alp))*b(1:k+1,k+1)'*ft';

%Next value for y
y(k+2) = T + 1/(gamma(alp))*(a(1:k+1,k+1)'...
*ft'+a(k+2,k+1)*f(t(k+2),yp));

%Update ft
ft(k+2) = f(t(k+2),y(k+2));
end
```



**fde\_ptwi.m**

```

function [y] = fde_ptwi(alp,f,h,y0,interval,itters)
%fde_ptwi() implements a fractional differential equation
%solver for equation  $D^{\text{alp}} y = f(t,y)$  using step size h and
%initial conditions y0 within interval.
%The integrals are computed using piecewise linear
%approximations with iterations.
%INPUT
%alp = the order of differentiation, alp>0
%f = the right hand side of the equation as a function
%handle @f
%h = step size
%y0 = initial conditions as a column vector
%interval = the interval for which the solution is
%computed as a vector
%itters = number of iterations for computing y
%OUTPUT
%y = the solution for the problem
%
%Lassi Korhonen, University of Oulu,
%Applied and Computational Mathematics, 2020

t_0 = interval(1);
t_n = interval(2);
N = floor((t_n-t_0)/h);
t = t_0:h:t_n;
y(1)=y0(1);
ft(1) = f(0,y0(1));
m = ceil(alp);

for k = 0:N-1

    %Weights for piecewise integrals
    a(1,k+1) = h^alp/(alp*(alp+1))*(k^(alp+1)-(k-alp)...
    *(k+1)^alp);
    if k >= 1
        j = 1:k;
        a(2:k+1,k+1) = h^alp/(alp*(alp+1))*((k-j+2)...
        .^(alp+1)+(k-j).^(alp+1)-2*(k-j+1).^(alp+1));
    end
    a(k+2,k+1) = h^alp/(alp*(alp+1));

    %Taylor polynomial for initial conditions
    tkj = ones(1,m).*t(k+2).^(0:m-1)./(factorial((0:m-1)));
    T = tkj*y0;

    %Next value for y using iterations
    y(k+2) = y(k+1);

```

### *Liite 3*

```
for l = 1:iters
    y(k+2) = T + 1/(gamma(alp))*(a(1:k+1,k+1)'...
        *ft'+a(k+2,k+1)*f(t(k+2),y(k+2)));
end

%Update ft
ft(k+2) = f(t(k+2),y(k+2));

end
```